

Физика конденсированных состояний



ТЕЗИСЫ

**III Международной конференции
«Физика конденсированных состояний» ФКС-2023,
посвященной 60-летию ИФТТ РАН**

Черноголовка, 29 мая – 2 июня 2023 г.

Российская академия наук
Министерство науки и высшего образования РФ
Научный совет РАН по физике конденсированных сред
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна
Российской академии наук

Третья Международная Конференция
**«Физика конденсированных
состояний» ФКС-2023,**
посвященная 60-летию ИФТТ РАН

Под редакцией д.ф.-м.н. Б.Б. Страумала

III International conference
“Physics of condensed states”

Черноголовка, 29 мая – 2 июня 2023 г.

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

Черноголовка
2023

Физика конденсированных состояний: сб. тезисов III Международной конференции (29 мая – 2 июня 2023 г., Черноголовка) / под ред. Б.Б. Страумала. – Черноголовка, 354 с. – ISBN 978-5-6045956-6-4.

ISBN 978-5-6045956-6-4



9 785604 595664

© Российская академия наук, 2023
© Страумал Б.Б. (редактор), 2023

Программный комитет конференции

Левченко А.А. – чл.-корр. РАН, директор ИФТТ РАН, председатель
Кведер В.В. – академик РАН, ИФТТ РАН, зам. председателя
Кукушкин И.В. – академик РАН, ИФТТ РАН, зам. председателя
Сурис Р.А. – академик РАН, ФТИ им. Иоффе РАН
Тимофеев В.Б. – академик РАН, ИФТТ РАН
Бородин В.А. – чл.-корр. РАН, ЭЗАН
Карпов М.И. – чл.-корр. РАН, ИФТТ РАН
Красильник З.Ф. – чл.-корр. РАН, ИФМС РАН
Кулаковский В.Д. – чл.-корр. РАН, ИФТТ РАН
Пудалов В.М. – чл.-корр. РАН, ФИАН
Смирнов А.И. – чл.-корр. РАН, ИФП РАН
Чугуева И.Н. – зам. директора департамента, Минобрнауки России
Волошин А.Э. – проф., ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» РАН
Девятов Э.В. – проф. РАН, ИФТТ РАН
Истомина Н.Л. – д.ф.м.н., ОФН РАН
Левин Ю.Б. – д.т.н., директор «Электронтех»
Рощупкин Д.В. – чл.-корр. РАН, директор ИПТМ РАН
Рязанов В.В. – проф., ИФТТ РАН
Сафонов О.Г. – проф. РАН, директор ИЭМ РАН
Страумал Б.Б. – проф., руководитель НЦЧ ИФТТ РАН

Организационный комитет конференции

Левченко А.А. – ИФТТ РАН, председатель
Девятов Э.В. – ИФТТ РАН, зам. председателя
Страумал Б.Б. – НЦЧ РАН, зам. председателя
Хорошева М.А. – ИФТТ РАН, учёный секретарь
Колесников Н.Н. – ИФТТ РАН
Терещенко А.Н. – ИФТТ РАН
Паленова А.Ю. – ИФТТ РАН
Камынина О.К. – ИФТТ РАН
Горнакова А.С. – ИФТТ РАН
Дружинин А.В. – ИФТТ РАН
Муравьев В.М. – ИФТТ РАН
Симонов С.В. – ИФТТ РАН
Шевчун А.Ф. – ИФТТ РАН
Поварова Л.И. – ИФТТ РАН

РАЗВИТИЕ НОВОЙ ПАРАДИГМЫ СПИНОВОГО ОБМЕНА С УЧЕТОМ ФОРМИРОВАНИЯ КОЛЛЕКТИВНЫХ МОД В РАЗБАВЛЕННЫХ РАСТВОРАХ ПАРАМАГНИТНЫХ ЧАСТИЦ

Салихов К.М.

*Казанский физико-технический институт ФИЦ “КазНЦ РАН”, Казань, Россия,
kevsalikhov@mail.ru*

В 2019 году мною была сформулирована новая парадигма спинового обмена в разбавленных растворах парамагнитных частиц и его проявления в ЭПР спектроскопии [1,2]. Согласно этой парадигме случайные бимолекулярные столкновения формируют коллективные моды движения средних по ансамблю значений векторов намагниченностей подансамблей частиц с разными собственными частотами прецессии.

Коллективные моды движения парциальных намагниченностей позволили объяснить замечательные проявления спинового обмена в форме спектров ЭПР: смешанная форма индивидуальных линий в спектре ЭПР; коллапс спектра в однородно уширенную линию в центре тяжести неоднородно уширенного спектра при малых концентрациях парамагнитных частиц.

Смешанная форма линий ЭПР позволила более надежно находить частоту бимолекулярных столкновений из анализа формы спектров ЭПР.

Новая парадигма также предсказывает образование спиновых поляритонов, которые являются квантовой суперпозицией микроволновых фотонов и коллективных мод намагниченности. Представлены экспериментальные данные зависимости резонансных частот спектров ЭПР растворов нитроксильных радикалов от мощности микроволнового поля, которые впервые подтверждают образование спиновых поляритонов за счет спинового обмена при случайных столкновениях частиц [3,4].

Предложена идея нового эксперимента, который даст дополнительное доказательство формирования коллективных мод намагниченности при наличии спинового обмена.

Отметим, что парамагнитная релаксация спинов за счет спектральной диффузии, например, химического обмена, описывается кинетическими уравнениями для намагниченности спинов, которые формально аналогичны уравнениям для спинового обмена. Поэтому основные положения новой парадигмы спинового обмена применимы и для этих случаев.

Литература

1. Салихов К.М. // УФН. – 2019. –Т. 189. – С. - 1017-1043.
2. Salikhov K.M. // Fundamentals of spin exchange. Story of a paradigm shift (Springer International Publishing, Switzerland, 2019
3. Bales B.L., Peric M., Dragutan I., Bowman M.K., Bakirov M.M., Schwartz R.N. // J. Phys. Chem. Lett. – 2022. – V.13. – p. 10952- 10957
4. Salikhov K.M., Bakirov M.M., Zaripov R.B., Khairutdinov I.T. Experimental Confirmation of the Formation of a Spin Polariton in Dilute Solutions of paramagnetic particles (2023, РССР, в печати)
5. Salikhov K.M // J. Phys. Chem. B. – 2020. - V.124. – p. 6628-6641
6. Salikhov K.M. // Applied Magnetic Resonance. – 2021. - V. 52. - P. 1063–1091

ФЕРМИ-ЖИДКОСТЬ КВАЗИЧАСТИЦ В ЦЕПОЧЕЧНОМ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКЕ $K_2CuSO_4Br_2$

А.И. Смирнов¹, Т.А. Солдатов¹, К.Ю. Поваров²

¹*Институт физических проблем им. П. Л. Капицы РАН, Россия, Москва*

²*ETH Zurich, Switzerland (предыдущий адрес)*

smirnov@kapitza.ras.ru

Одномерные цепочки спинов $S=1/2$ с антиферромагнитным обменом обладают необычным основным состоянием в виде квантовой спиновой жидкости, в котором нет классического порядка. Это состояние сильно коррелировано и описывается как ансамбль квазичастиц с дробным спином, называемых спинонами. Возбуждения, наблюдаемые в экспериментах, представляют собой парные образования типа “квазичастица-дырка” в системе спинов-фермионов, заполняющих состояния внутри поверхности Ферми. От обычных фермиевских систем типа электронов в металлах, спиновые цепочки отличаются тем, что эти фермионы не являются микрочастицами материи, а представляют собой коллективные динамические структуры макроскопической спиновой системы диэлектрического кристалла. В нашей работе мы изучаем спектры поглощения электромагнитных волн в кристалле $K_2CuSO_4Br_2$, содержащем цепочки ионов Cu^{2+} ($S=1/2$), и получаем экспериментальные свидетельства взаимодействия спинов [1]. Взаимодействие спинов приводит к добавочному сдвигу границ спектра поглощения в магнитном поле. На основе экспериментального определения границ спектра была определена вероятность рассеяния спинов друг на друге.

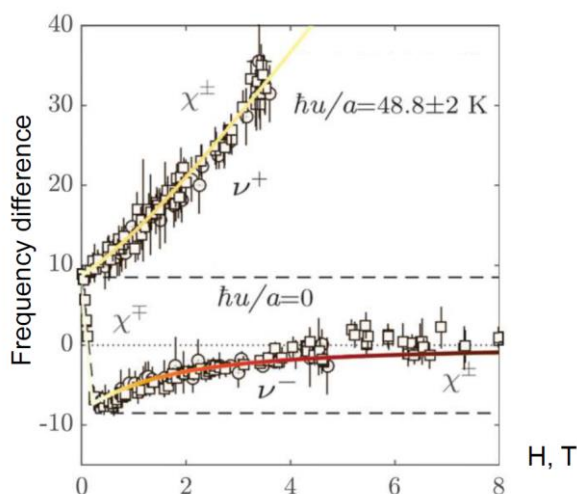


Рисунок показывает отличие граничных частот спектра поглощения от частоты прецессии свободных спинов при температуре 0.5 K в зависимости от поля. Видно хорошее соответствие теории, включающей взаимодействие спинов (сплошные линии) и эксперимента (символы), u - параметр взаимодействия [1]. Для газа свободных спинов точки лежали бы на горизонтальных пунктирах ($u=0$). Эти результаты указывают на ферми-жидкостное (то есть не ферми-газовое) поведение спинов.

Литература

1. K.Yu. Povarov, T. A. Soldatov, Ren-Bo Wang, A. Zheludev, A.I. Smirnov, O.A. Starykh // *Phys. Rev. Lett.* **128**, 187202 (2022).

МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СКИРМИОНО-ПОДОБНЫХ СТРУКТУР

Мамин Р.Ф., Шапошникова Т.С.

*Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН,
г. Казань, Россия, E-mail: mamin@kfti.knc.ru*

Магнитоэлектрический эффект давно активно изучается. В последнее время получены новые материалы с интересными характеристиками для практического применения [1, 2]. Он часто наблюдается в мультиферроиках [2]. В данной работе в рамках феноменологической модели рассмотрена возможность магнитоэлектрического эффекта в системах с неоднородным магнитным упорядочением. Микроскопический механизм возникновения магнитоэлектрического эффекта в таких системах обусловлен наличием взаимодействием Дзялошинского-Мории [3, 4]. В работе рассмотрена возникновения электрической поляризации как в малых трехмерных шарообразных магнитных частицах, находящихся в парамагнитной матрице, так и в «обычных» двумерных скирмионах. Неоднородное распределение намагниченности приводит к неоднородной электрической поляризации. В результате воздействие магнитного поля на магнитную подсистему приводит к изменению электрической поляризации, и в результате возникает магнитоэлектрический отклик. Конкретный вид выражений для электрической поляризации и магнитоэлектрического отклика определяется неоднородным распределением намагниченности в областях локализации таких скирмионоподобных структур. Ненулевой магнитоэлектрический отклик наблюдается только при определенных направлениях внешнего магнитного поля.

Исследование выполнено в рамках темы государственного задания ФИЦ КазНЦ РАН.

Литература

1. Spaldin N.A., Ramesh R. // Nat. Mater. – 2019 – V. 18 – P. 203.
2. Fiebig M., Lottermoser T., Meier D., Trassin M. // Nat. Rev. Mater. – 2016 – V. 1 – 16046.
3. Дзялошинский И.Е. // ЖЭТФ – 1960 – Т. 37 – В.3 – С. 881-882.
4. Morya T. // Phys. Rev. – 1960 – V. 120 – P. 91.

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ИНТЕРФЕЙСОВ ПЛЕНОЧНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР СЕГНЕТОЭЛЕКТРИК/ДИЭЛЕКТРИК

Мамин Р.Ф.

*Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН,
г. Казань, Россия, E-mail: mamin@kfti.knc.ru*

В гетероструктуре, состоящей из двух непроводящих оксидов LaAlO_3 и SrTiO_3 , было обнаружено состояние с высокой подвижностью носителей на интерфейсе [1]. Так же было наблюдался переход в сверхпроводящее состояние при температурах ниже 300 мК [3]. Мы исследовали гетероструктуры на основе сегнетоэлектрических и диэлектриков оксидов со структурой типа $\text{BaTiO}_3/\text{LaMnO}_3$ и $\text{BaTiO}_3/\text{La}_2\text{CuO}_4$, и, с помощью расчётов из первых принципов, промоделировали электронные и магнитные свойства этих гетероструктур. Было показано, что в обеих гетероструктурах $\text{BaTiO}_3/\text{LaMnO}_3$ и $\text{BaTiO}_3/\text{La}_2\text{CuO}_4$ в области интерфейса исчезает запрещенная зона и система переходит в состояние с металлической проводимостью по интерфейсу. Далее были получены образцы гетероструктур $\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{TiO}_3/\text{LaMnO}_3$, и экспериментально показано возникновение квазидвумерной проводимости на интерфейсе. В данной работе мы исследовали свойства пленочных гетероструктур $\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{TiO}_3/\text{LaMnO}_3/\text{Ba}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{TiO}_3/\text{MgO}$ (BSTO/LMO/BSTO/MgO) и $\text{LaMnO}_3/\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}/\text{Ba}_{0.4}\text{Sr}_{0.6}\text{TiO}_3/\text{MgO}$ (LMO/BiTO/BSTO/MgO) с различной толщиной слоев BSTO и LMO, и влияние освещения на сопротивление этих гетероструктур.

При исследовании гетероструктур BSTO/LMO/BSTO/MgO с различной толщиной слоев $\text{Ba}_{0.4}\text{Sr}_{0.6}\text{TiO}_3$ обнаружено квазиметаллическое поведение при температурах ниже 175 К. В гетероструктуре LMO/BiTO/BSTO/MgO выше 180 К наблюдается активационный режим с энергией активации 0,28 эВ, в диапазоне температур 120-180 К существует аномальная область с двумя максимумами сопротивления, и при температурах ниже 120 К происходит стремительное уменьшение сопротивления с переходом к температурному поведению характерному для металлов. Особенности проводимости при низких температурах, по нашему мнению, связаны с перестройкой электронной подсистемы в области интерфейса вследствие влияния поляризации сегнетоэлектрической пленки, что приводит к значительному увеличению концентрации свободных носителей на интерфейсе.

При исследовании гетероструктур BSTO/LMO/BSTO/MgO и LMO/BiTO/BSTO/MgO обнаружен своеобразный эффект увеличения сопротивления гетероструктуры во время однородного освещения гетероструктуры светом различного спектрального состава. Эффект состоит в том, что при освещении сопротивление гетероструктуры, измеренное вдоль интерфейса, увеличивается, что не может быть объяснено нагревом. Величина эффекта зависит от спектрального состава света, и наибольший эффект наблюдается при освещении зеленым светом. Аналогичное увеличение концентрации заряда на поверхности обнаружено методом Кельвин моды атомной силовой микроскопии при освещении гетероструктуры зеленым светом.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-12-00179.

Литература

1. Ohtomo A., Ywang H. // *Nature* – 2004. – **427**. – 6973.
2. N. Reyren, S. Thiel, A. D. Caviglia, et al. // *Science*. – 2007. – **317**. – 1196.

ВЛИЯНИЕ КИСЛОРОДНЫХ ВАКАНСИЙ НА ЯВЛЕНИЕ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА В ОКСИДНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ (TiO₂) С ИМПЛАНТИРОВАННОЙ ПРИМЕСЬЮ КОБАЛЬТА

Хайбуллин Р.И.¹, Базаров В.В.¹, Вахитов И.Р.^{1,2}, Гумаров А.И.^{1,2}, Гумаров Г.Г.¹,
Жарков Д.К.¹, Лядов Н.М.¹, Суханов А.А.¹, Шмелев А.Г.¹, Тагиров Л. Р.^{1,2}

¹ Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН,
Казань, Россия, rikkfti@mail.ru

² Казанский федеральный университет, Казань, Россия, ltagirov@mail.ru

Нестехиометрические по содержанию кислорода оксидные полупроводники (TiO₂, ZnO, и др.) с примесью 3d-элементов проявляют высокотемпературный ферромагнетизм и мемристорный эффект, что обуславливает перспективу их применения в полупроводниковой спинтронике и индустрии энергонезависимой памяти. Однако физическая природа наблюдаемого в них ферромагнетизма и его взаимосвязь с дефектами структуры до сих пор является предметом острых научных дискуссий. Не ясно даже в какой степени наблюдаемый ферромагнетизм обусловлен непрямым обменным взаимодействием между магнитными ионами 3d-примеси (Co²⁺, Fe³⁺, Mn²⁺ и др.), например, через электрон, локализованный на кислородной вакансии, и в какой степени – преципитацией примеси в форме магнитных наночастиц, диспергированных в полупроводниковой матрице.

В данной работе мы детально исследовали влияние точечных дефектов - кислородных вакансий на проявление ферромагнетизма (петли магнитного гистерезиса, МОКЭ, ФМР) в монокристаллических пластинках рутила (TiO₂), легированных примесью кобальта методом ионно-лучевой имплантации. Исходно высокое содержание кислородных вакансий (O_v) в ферромагнитных образцах TiO₂ обеспечивалось непосредственно методикой их получения в следствие облучения TiO₂ интенсивным потоком 40 кэВ ионов кобальта. Кислородные вакансии (их концентрация, зарядовое и магнитное состояние) характеризовались методами СЭМ, ЭПР, оптической и фотолюминесцентной спектроскопией. После ионного облучения содержание кислородных вакансий в образцах контролируемым образом изменялась путем электромиграции или электро-индуцированной инъекции вакансий из анода под действием приложенного электрического потенциала. Детально исследовались магнитные и электрические свойства двух принципиально различных типов ферромагнитных образцов TiO₂, полученных при различных режимах ионного облучения. Согласно структурным данным ПЭМ, РФЭС, спектроскопии обратного резерфордского рассеяния в 1-ом типе образцов большая часть имплантированной примеси находилась в форме наночастиц металлического кобальта. Напротив, во 2-ом типе ферромагнитных образцов доминировал твердый раствор внедрения ионов Co²⁺ в кристаллической структуре TiO₂. В целом, результаты наших исследований показывают, что наличие кислородных вакансий, практически, не оказывает никакого влияния на магнитные характеристики нанокomпозитных образцов 1-ого типа, проявляющих полуметаллический тип проводимости. С другой стороны, обнаружено сильное влияние кислородных вакансий на магнитные и электрофизические характеристики полупроводниковых образцов 2-ого типа. В частности, показано, что путем изменения концентрации O_v можно контролируемым образом менять намагниченность насыщения и тип магнитной анизотропии образцов. Предложена модель, объясняющая совокупность полученных результатов.

Исследование выполнено в рамках гранта РФФИ № 22-19-00712, <https://rscf.ru/project/22-19-00712/>, ФИЦ КазНЦ РАН.

ПЕРИОДИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ ХИРАЛЬНОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА

Долганов В. К.

*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия,
dolganov@issp.ac.ru*

Фрустрации в кристаллах и жидких кристаллах приводят к образованию ряда фаз с нетривиальной структурой. В хиральных жидких кристаллах период упорядочения таких структур существенно больше средних межмолекулярных расстояний и может быть порядка длины волны видимого света. Известным примером структур с трехмерным упорядочением, наблюдающихся в хиральных жидких кристаллах, являются так называемые Голубые Фазы. Они образованы пространственно упорядоченными линейными топологическими дефектами. Периодические или модулированные структуры также могут образовываться во внешнем электрическом и магнитном поле, в результате механического растяжения или сдвига, а также из-за специфических граничных условий [1]. Благодаря уникальным оптическим свойствам и восприимчивости к внешним воздействиям подобные структуры перспективны для применения в фотонике.

В докладе будут представлены результаты работ по исследованию модулированных структур в хиральных жидких кристаллах [2,3]. Структуры получены на основе жидкого кристалла, образующего холестерическую (хиральную нематическую) фазу с одномерным геликоидальным упорядочением ориентации молекул. При высокой температуре, вблизи перехода в изотропную фазу образуется ряд структур, в которых размерность упорядочения определяется шагом спирали холестерика. При увеличении шага спирали вблизи перехода в изотропную фазу наблюдалось последовательное образование структур с трехмерной, двумерной и одномерной периодичностью. Особое внимание в докладе уделяется структуре с двумерным упорядочением в плоскости образца. Приводятся результаты оптических и спектральных исследований. Обсуждается нетривиальная зависимость вида структуры от поляризации световой волны. Проведено сопоставление с литературными данными и обсуждаются возможные направления дальнейших исследований.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИФТТ РАН.

Литература

1. Blanc C., Durey G., Kamien R.D., Lopez-Leon T., Lavrentovich M.O., Tran L. // *Rev. Mod. Phys.* – 2023. – Vol. 95 – № 1. P. – 015004.
2. Dolganov P.V., Baklanova K.D., Dolganov V.K. // *Phys. Rev. E.* – 2022. – Vol. 106. – № 1. P. – 014703.
3. Бакланова К.Д., Долганов В.К., Кац Е.И., Долганов П.В. // *Письма в ЖЭТФ.* – 2023. – № 7. С. – 537-542.

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ПОРЯДОК-БЕСПОРЯДОК В СПЛАВЕ Fe_3Al С УЧЕТОМ ПЕРВИЧНОГО И ВТОРИЧНОГО ПАРАМЕТРОВ ПОРЯДКА

Метлов Л. С.

ГБУ “Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина”, Донецк, РФ
Донецкий национальный университет, Донецк, РФ, lsmet@donfti.ru

В предыдущем варианте рассмотрения задачи было обращено внимание на то, что в некотором приближении описание фазовых переходов типа беспорядок – порядок в сплавах Fe_3Al можно построить в терминах деформационного параметра порядка [1, 2]. Однако, более полная теория может быть построена, базируясь одновременно на концентрационном (первичном) и деформационном (вторичном) параметрах порядка. Свободная энергия такого сплава f есть сумма $f = f_d + f_1 + f_2 + f_{int}$. Здесь f_d – деформационная часть свободной энергии, как функция одной из компонент тензора деформации $e_3 = e_{zz}$ [2]. Величина e_3 служит мерой тетрагональности искажения решетки. Далее, f_1, f_2 – концентрационные части свободной энергии, связанные с параметрами порядка S_1' и S_2' , соответственно (определения параметров порядка см. [2]), f_{int} – часть свободной энергии, отвечающая за взаимодействие концентрационного и деформационного параметров порядка. В явном виде

$$f_i = a_i (S_i')^2 / 2 + c_i (S_i')^4 / 4, \quad (1)$$

где a_i, c_i – некоторые константы теории, температурная зависимость осуществляется в стандартном для теории Ландау виде через коэффициент a_i .

$$a_1 = a_{01} \left(\frac{T}{T_1} - 1 \right), \quad a_2 = a_{02} \left(\frac{T}{T_2} - 1 \right), \quad a = a_0 \left(\frac{T}{T_m} - 1 \right), \quad (2)$$

где T_1, T_2, T_m – критические температуры фазовых переходов беспорядок – полубеспорядок, полубеспорядок – порядок и собственно мартенситного перехода, соответственно. При этом вполне естественно справедливы неравенства $T_1 > T_2 > T_m$. Таким образом, при понижении температуры из области $T > T_1$ в таком сплаве будет наблюдаться цепочка фазовых превращений указанного выше типа.

Особый интерес представляет изучить влияние на характер тетрагональности взаимодействия между параметрами порядка. Для частного случая одновариантного мартенсита

$$f_{int} = g_{13} S_1' e_3 + g_{23} S_2' e_3. \quad (3)$$

Степень тетрагональности e_3 в интервале $T_1 \div T_2$ и $T_2 \div T_m$ будет равна

$$e_3 = -\frac{g_{13}}{a} \sqrt{-\frac{a_1}{c_1}} \quad \text{и} \quad e_3 = -\frac{1}{a} \left(g_{13} \sqrt{-\frac{a_1}{c_1}} + g_{23} \sqrt{-\frac{a_2}{c_2}} \right), \quad (12)$$

соответственно. Таким образом, в обоих интервалах будет иметь место слабая тетрагональность (фаза t' , аналогичная [4]), наведенная разделением компонентов по подрешеткам, в то время, как основная тетрагональная фаза ниже температуры T_m еще не зародилась.

Литература

1. Метлов Л.С. // Сборник тезисов XII Международной конференции ФППК-2022, 24-27 октября 2022 г. Черноголовка, Россия. С. 11.
2. Метлов Л.С. // ФТВД. – 2022. – Т. 32. – № 3. С. – 12-20.
3. Метлов Л.С. // ФТВД. – 2023. – Т. 33. – № 2.(в печати).
4. С. Viazzi at al. J. Alloys Compd. **452**, 377 (2008).

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАРТЕНСИТНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ, С ЧЕРЕДОВАНИЕМ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ И ЛАЗЕРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Метлов Л.С.^{1,2}, Блинова Е.Н.³, Либман М.А.³

¹ГУ “Донецкий физико-технический институт”, Донецк, РФ,

²Донецкий национальный университет, Донецк, РФ lsmet@donfti.ru

³Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии им. И. П. Бардина, Москва

В последнее время большое внимание уделяется созданию в некоторых сплавах неоднородных структур, состоящих из областей аустенита, сформированных с помощью локального лазерного воздействия в мартенситной матрице [1]. Представляет интерес промоделировать весь цикл обработки, используя релаксационные уравнения Ландау-Халатникова на примере сплава Гейслера [2]. Результаты расчетов представлены на рис. 1.

В области I на рис. 1, в при температуре, принадлежащей области лабильности фаз, материал релаксирует из некоторого произвольного начального состояния в область аустенитного минимума (0 на рис. 1, а). В области II начинает действовать сжимающая внешняя сила, что переводит материал в мартенситный минимум 1, который углубляется за счет внешней силы (рис. 1, б). В области III внешняя сила прекращает действовать и материал снова релаксирует в менее глубокий минимум 1. В области IV включается лазерный нагрев, и материал переводится в аустенитное состояние, в области V после охлаждения до исходной температуры он остается в аустенитном состоянии.

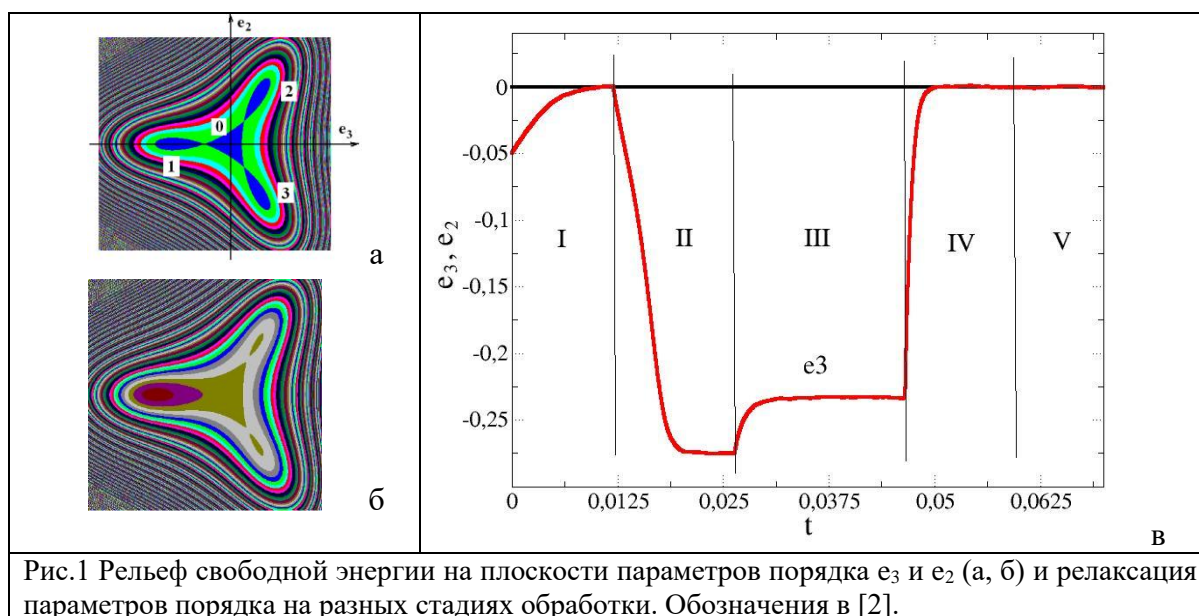


Рис.1 Рельеф свободной энергии на плоскости параметров порядка e_3 и e_2 (а, б) и релаксация параметров порядка на разных стадиях обработки. Обозначения в [2].

Таким образом, если весь материал будет обработан согласно областей I – III на рис. 1, в, а отдельные участки будут обработаны лазером (области IV, V), то будет получена желаемая неоднородная структура.

[1] Блинова Е.Н. и др. // Изв. РАН. Сер. Физич. – 2021. – Т. 85. – № 7, С. – 984-989.

[2] Метлов Л.С. и др. // ФТВД. – 2023. – Т. 33. – No 1. С. – .

ФОРМИРОВАНИЕ ДЕФЕКТНОЙ СТРУКТУРЫ, РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ И КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ

Хоник В.А.¹, Кобелев Н.П.²

¹*Воронежский государственный педагогический университет, Воронеж, РФ,*
v.a.khonik@yandex.ru

²*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, РФ,*
kobelev@issp.ac.ru

Несмотря на многолетние исследования, до сих пор отсутствуют общепризнанные представления о способах описания структуры металлического стекла и физических процессов, лежащих в основе протекающих в нем релаксационных явлений. В докладе представлены экспериментальные свидетельства и теоретические расчеты, свидетельствующие об адекватности подхода к этой проблеме, основанного на Межузельной теории (МТ) строения металлического стекла. Согласно МТ, плавление кристалла связано с генерацией межузельных дефектов в гантельной конфигурации, которые обладают высокой сдвиговой восприимчивостью и высокой энтропией формирования. При закалке расплава междоузельные диполи замораживаются в структуре материала, и эволюция дефектной подсистемы определяет релаксацию его физических свойств. В основе математического формализма МТ лежат два простых уравнения, связывающие величину модуля сдвига и энтальпию стекла с концентрацией межузельных дефектов. Несмотря на кажущуюся “примитивность” получающихся отсюда зависимостей, они хорошо количественно описывают эксперимент.

В докладе подробно проанализирована кинетика структурной релаксации металлического стекла и связанные с ней изменения модуля сдвига и тепловые явления. Показано, что экспериментальные зависимости полностью соответствуют прогнозируемым в рамках МТ. Рассмотрены эксперименты, направленные на проверку базовых гипотез МТ. Показано, что кинетика изменения объема металлических стекол при различных сценариях структурной релаксации полностью описывается зависимостями, даваемыми МТ. Продемонстрировано, что в соответствии с МТ, свойства металлического стекла естественным образом связаны со свойствами материнского кристалла, а избыточная внутренняя энергия стекла определяется упругой энергией дефектной подсистемы, так что теплота кристаллизации примерно равна упругой энергии этих дефектов. Оценка избыточных термодинамических потенциалов стекол показала, что их величины и температурные зависимости соответствуют МТ. Прослежена связь бозонного пика теплоемкости в металлических стеклах с концентрацией межузельных дефектов, в полном соответствии с Межузельной теорией. Рассмотрение междоузельных дефектов как упругих диполей привело к заключению о важной роли процессов их кластеризации при формировании металлического стекла. Это означает, что стекло представляет собой существенно гетерогенную структуру, состоящее из кластеров большого размера, формирующих аморфную “матрицу”, и отдельных диполей и малых кластеров, которые можно рассматривать как “дефекты” структуры. Изменение относительной концентрации этих “дефектов” при внешних воздействиях и определяет причину релаксационных процессов в стекле.

ПЛАВЛЕНИЕ В ЛАЗЕРНОЙ УДАРНОЙ ВОЛНЕ, ДИНАМИКА ПЛАСТИЧЕСКИХ ТРАНСФОРМАЦИЙ И ОСТАТОЧНЫЙ СЛЕД В ИЗДЕЛИИ

Ашитков С. И.¹, Жаховский В. В.², Иногамов Н. А.^{3,2}, Колобов Ю. Р.⁴,
Манохин С. С.⁴, Неласов И. В.⁴, Перов Е. А.¹, Петров Ю. В.³, Фортгова С. В.⁵,
Хохлов В. А.³, Шепелев В. В.⁵

¹ОИВТ РАН, Москва, РФ, ashitkov11@yandex.ru

²ВНИИА им. Н.Л. Духова, Росатом, Москва, РФ, basi1z@gmail.com

³ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, Черноголовка, РФ, nailinogamov@gmail.com

⁴ИПХФ РАН, Черноголовка, РФ, kolobov@bsu.edu.ru

⁵ИАП РАН, Москва, РФ, sfortova@mail.ru

Разработана физическая модель, создан гибридный вычислительный код и проведены эксперименты по трансформации подповерхностного объема мишени лазерным воздействием на примере технически чистого титана [1-3]. Изучена модификация кристаллической структуры в объеме подповерхностного слоя. Обнаружено, что у поверхности на глубине в мишень 1-10 микрон внутри пятна лазерной фокусировки имеет место сильнейшее изменение исходной крупнокристаллической структуры. Исходная структура представляла собой кристаллиты размерами 30-35 мкм. То есть в объеме слоя преобразования мишень была эквивалентна монокристаллу, поскольку толщина трансформированного слоя меньше исходного размера кристаллита. Трансформация заключалась в появлении слоя нанокристаллитов толщиной около 1 мкм. Под этим слоем залегает слой толщиной 5-10 мкм, в котором концентрация дислокаций плавно убывает от очень высоких значений до умеренных. У границы поля дислокаций с слоем нанокристаллитов сформированы дислокационные ячейки. Нанокристаллиты имеют необычную форму. Они сильно вытянуты не только в направлении градиента температуры, то есть по нормали к границе, но и перпендикулярно к этому направлению. Использовался TiS лазер с длительностью импульса 0.1 пс (10^{-13} с). Размер фокального пятна на поверхности около ста микрон. Титан – металл с очень низкой теплопроводностью. Поэтому толщина слоя прогрева за счет теплопроводности порядка 1-2 толщин скин слоя, т.е. порядка 20-30 нм. Наше моделирование прослеживает череду разворачивающихся событий, инициированным облучением. Интенсивность излучения предельная – ограничена пробоем воздуха. Возникающие начальные давления колоссальны – около 10 Мбар. При распространении ударная волна затухает. Пока ее амплитуда выше примерно 1 Мбар эта волна плавит титан. Толщина слоя плавления сравнима с толщиной слоя нанокристаллитов. Она намного превышает толщину слоя прогрева за счет теплопроводности.

Литература

1. Shepelev V.V. et al. // Opt. Laser Techn. – 2022. – V. 152. P. – 108100.
2. Иногамов Н.А. и др. // Письма ЖЭТФ. – 2022. – Т. 115. – № 2. – С. 80-88.
3. Хохлов В.А. и др. // Письма ЖЭТФ. – 2022. – Т. 115. – № 9. – С. 576-584.

ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И ЗАЩИТНЫЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ КАРБИДА КРЕМНИЯ ДЛЯ КОНСТРУКЦИОННЫХ ПРИМЕНЕНИЙ

Курлов В.Н., Шикунов С.Л., Каледин А.В.

Институт физики твёрдого тела РАН, г. Черноголовка, Россия, kurlov@issp.ac.ru

Керамические материалы на основе карбидокремниевой керамики обладают высокой механической прочностью и окислительной стойкостью при температурах до 1500°C, твёрдостью, износостойкостью, низким коэффициентом термического расширения, устойчивостью к радиационным воздействиям, высокой химической инертностью и теплопроводностью.

В ИФТТ РАН разработана оригинальная методика получения композиционных материалов на основе карбидокремниевой керамики, в том числе крупногабаритные изделия и детали сложной геометрической формы. Методика основана на механизме взаимодействия расплава кремния с углеродсодержащей заготовкой определенного состава (углерод, коксующееся связующее) и пористости. Изменяя фракционный состав порошков углеродного наполнителя, количество связующего и давление прессования углеродных заготовок, после их силицирования можно получать композиционные керамические материалы и изделия сложной формы с различным соотношением фаз SiC-Si-C, Рис. 1.

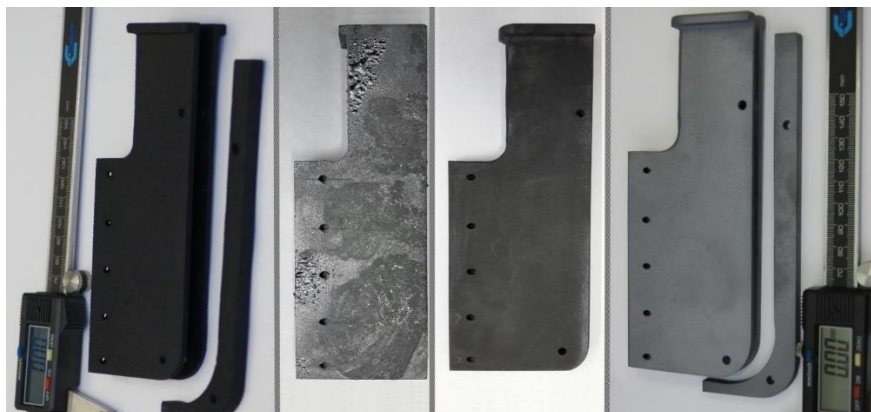


Рис.1. Стадии изготовления детали сложной геометрической формы из материала на основе SiC керамики с SiC покрытием (слева углеродная заготовка до силицирования).

Для расширения областей применения керамических материалов на основе SiC разрабатывается методика получения металлокерамических композиционных материалов путём силицирования смеси углерода и тугоплавких металлов (Ti, Mo, Nb, W) и сплавов в виде мелкодисперсных порошков, фольг и стержней. Композиционный материал имеет SiC матрицу, армированную металлами и/или их силицидами, которые формируются в процессе пропитки пористой углеродно-металлической заготовки кремнием.

Для повышения рабочих температур изделий из графита, углерод-углеродного композиционного материала и композиционной карбидокремниевой керамики разработан метод получения защитных покрытий на основе карбида кремния. Метод основан на взаимодействии расплава/или паров кремния и углерода, образующегося при расщеплении молекул углеводорода, подаваемого в тепловую зону вакуумной печи. Скорость наращивания покрытия на углеродную или SiC подложку составляет от 10 до 100 мкм в час, что на несколько порядков выше скорости образования покрытия CVD методом. Получаемые покрытия обладают высокой адгезией к поверхности, т.к. в их образовании участвует непосредственно материал подложки.

КОГЕРЕНТНЫЕ ВИХРИ В ДВУМЕРНОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ**Колоколов И.В.¹**¹*Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау, Черногловка, Россия*

Основным свойством турбулентности в двумерных системах является так называемый обратный каскад, который ведет к передаче энергии от мелкомасштабных движений ко все большим и большим масштабам; когда каскад достигает размеров системы, то следует ожидать генерацию среднего течения, которое затем существенно модифицирует турбулентность. В работах нашей группы было обнаружено, что в конечной системе такой обратный каскад приводит к формированию когерентных вихрей – конденсата. Генерация крупномасштабных вихрей наблюдалась в лабораторных экспериментах, выполненных, в частности, в ИФТТ на тонких жидких слоях в квадратной ячейке. Нам удалось построить последовательную схему, которая привела к полному количественному аналитическому описанию центральной зоны вихря и к оценке его размера как функции параметров задачи.

ЖАРОПРОЧНЫЕ СПЛАВЫ НА ОСНОВЕ МОЛИБДЕНА. НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ И НОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

М.И. Карпов

ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия

karpov@issp.ac.ru

В период существования СССР в стране было разработано большое количество сплавов на основе молибдена, изготавливаемых методами вакуумной плавильной технологии. Разработка составов сплавов и технологии производства изделий из них проводилась на предприятиях цветной металлургии, черной металлургии, авиационной промышленности при участии Академии наук СССР. Основная часть продукции выплавлялась методом дуговой вакуумной плавки, позволявшей получать слитки с содержанием кислорода на уровне 30 ppm с размером зерна 3-5 мм. В конце 70-х стала развиваться технология изготовления слитков методом электронно-лучевой вакуумной плавки, позволившая снизить содержание кислорода в слитках до уровня 10 ppm. Но такие слитки из-за более крупного зерна были мало технологичны при последующей обработке давлением. В начале 21-го века в России стало очевидным, что качество продукции из молибдена и его сплавов, изготавливаемой из слитков вакуумной дуговой плавки уже не отвечает современным требованиям главных отраслей отечественной промышленности.

Новым центром развития металлургии вакуум плавленного молибдена стал ИФТТ РАН, сохранивший после распада СССР мощную исследовательскую и опытно-промышленную базу для разработки новых сплавов и новых технологий производства продукции из тугоплавких металлов. Все исследования в институте проводятся в тесном контакте с отечественными предприятиями аэрокосмической, атомной, электронной промышленности, институтами РАН и ведущими университетами страны.

Одной из первых новых технологий стал «дуплекс процесс» изготовления слитков. Изготовление слитков по этой технологии позволило существенно повысить качество продукции из наиболее востребованных в настоящее время сплавов молибдена еще советской разработки: МЧВП, ТСМ, ЦМ2А. Разработаны новые технологии производства гранул из сплавов молибдена, показана возможность их применения в аддитивных технологиях, основанных на лазерной 3d печати или в технологиях порошковой металлургии. Разработаны новые сплавы на основе молибдена, значительно превосходящие по своим прочностным характеристикам существующие. Создано новое направление в материаловедении сплавов на основе молибдена – сильно легированные сплавы, принципиально отличающиеся по своей структуре от мало легированных сплавов.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИФТТ РАН

НЕРАВНОВЕСНАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В ТОНКОЙ ПЛЕНКЕ NbSe₂

Тихонов Е.С., Прокудина М.Г., Шевчук А.Ф.

Институт Физики Твёрдого Тела РАН,
г. Черногловка, tikhonov@issp.ac.ru

Известно, что неравновесная функция распределения квазичастиц в сверхпроводнике может существенно влиять на его транспортные характеристики. В частности, как показано в теоретической работе [1], при пренебрежимо малой электрон-фононной релаксации в сверхпроводящем проводе, подключенном между двумя нормальными берегами, не может существовать сверхпроводящее состояние для тянущих напряжений, больших чем щель. В реальности же в любом материале всегда присутствует электрон-фононная релаксация, темп которой и определяет степень неравновесности функции распределения квазичастиц. В соответствии с этим представляет интерес развитие новых экспериментальных способов изучения неравновесных сверхпроводников. В данной работе реализован эксперимент по изучению тонкопленочного сверхпроводника NbSe₂, выложенного на предварительно изготовленные нормальные контакты.

На рисунке ниже приведено схематическое изображение образца. Контакт #3 демонстрирует дифференциальный кондактанс туннельного типа, а подщелевое сопротивление между контактами #1 и #2 подавлено по сравнению с его же значениями над щелью. По масштабу величины при $T = 0.7$ К в режиме линейного отклика сопротивление между контактами #1 и #2 составляет примерно 100 Ом, а сопротивление туннельного контакта #3 примерно 15 кОм. Мы используем этот контакт, во-первых, для локального изучения неравновесного сверхпроводника в транспортном эксперименте (туннельная спектроскопия), а во-вторых, для локального шумового эксперимента с целью определения локальной температуры сверхпроводника при протекании через него тока (шумовая спектроскопия). Результаты измерений токовых флуктуаций позволяют оценить, в частности, длину электрон-фононной релаксации в изучаемой пленке и показатель степени для теплоотдачи в фононную подсистему, а результаты туннельной спектроскопии – проследить переход между сверхпроводящим и нормальным состояниями в сверхпроводнике под действием протекающего по нему тока.

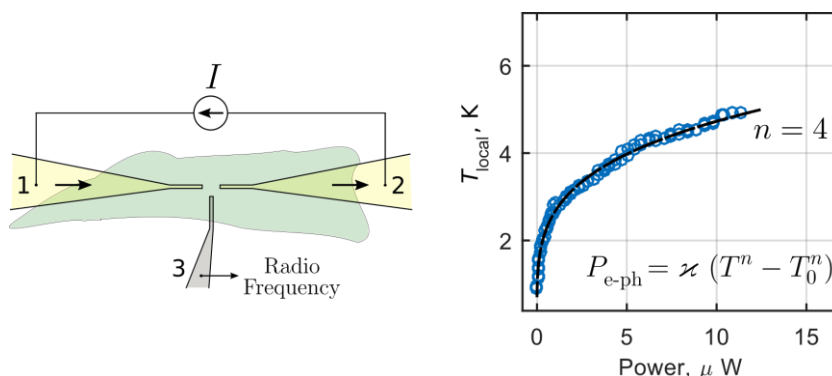


Рисунок 1: Слева: схематическое изображение образца. Справа: локальная температура электронной подсистемы в NbSe₂ под туннельным контактом в зависимости от полной джоулевой мощности, выделяемой на образце.

[1] R. S. Keizer et al., PHYSICAL REVIEW LETTERS 96, 147002 (2006)

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ КОЭФФИЦИЕНТА ХОЛЛА В МОНОКРИСТАЛЛАХ $(\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x)\text{Te}_3$ ($0 < x < 2$)

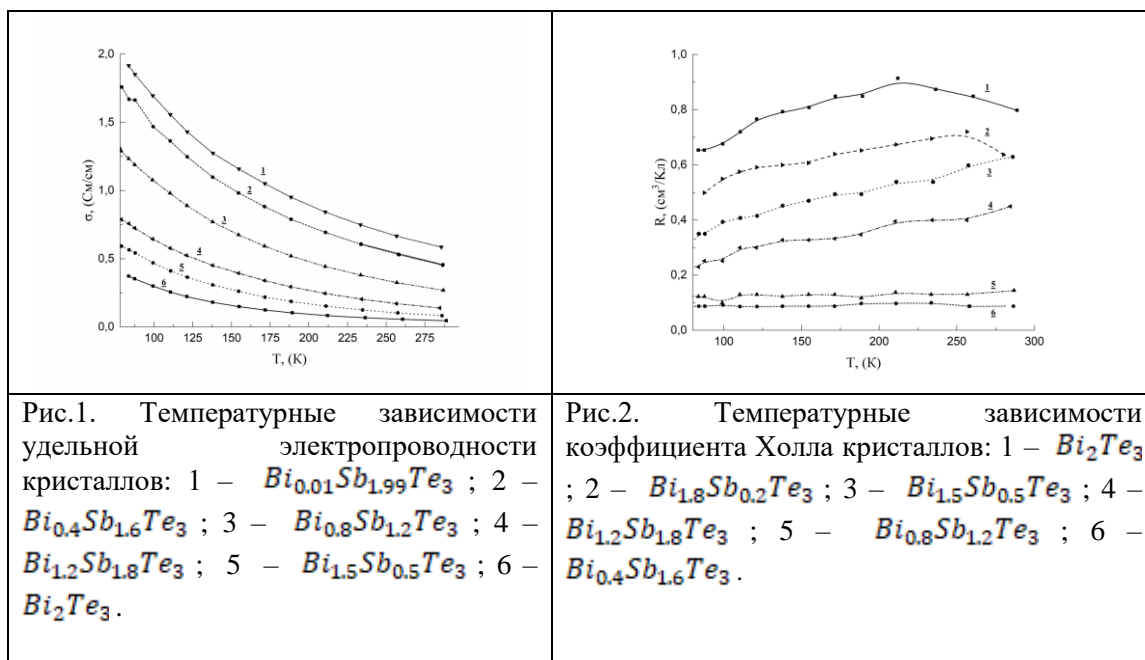
Иванов М.С.¹, Степанов Н.П.²

¹ *Забайкальский институт железнодорожного транспорта, Чита, Россия,
ivanov.maks@mail.ru*

² *Забайкальский государственный университет, Чита, Россия, np-stepanov@mail.ru*

Исследовались монокристаллы твердых растворов $(\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x)\text{Te}_3$ ($0 < x < 2$) выращенные методом Чохральского в институте металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН. Измерение удельного сопротивления и коэффициента Холла проводилось в интервале температур 78–300 К при ступенчатом изменении температуры, с ее стабилизацией в точке измерения, в магнитном поле до 0,65 Тл на постоянном токе, двухзондовым методом.

Температурные зависимости удельной электропроводности кристаллов $(\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x)\text{Te}_3$ ($0 < x < 2$) отражены на рис.1. Видно, что происходит рост ее абсолютных значений при увеличении содержания теллурида сурьмы, однако, сохраняется вид зависимости от температуры. На рис.2 приведены температурные зависимости коэффициента Холла кристаллов $(\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x)\text{Te}_3$. Видно, что в области низких температур 78 К наблюдается уменьшение коэффициента Холла при увеличении x от 0 до 2, свидетельствующее о росте концентрации легких дырок. Также видно, что с ростом температуры коэффициент Холла монотонно изменяется во всех исследованных кристаллах. Однако, в кристалле Bi_2Te_3 его увеличение заканчивается при температуре 225 К, а в кристалле $\text{Bi}_{1.9}\text{Sb}_{0.1}\text{Te}_3$ – при температуре 250 К. Известно, что в кристаллах Sb_2Te_3 максимум $R_H(T)$ наблюдается при температуре 600 К [1]. Это свидетельствует о том, что уровень химического потенциала смещается в глубину валентной зоны, при увеличении x в кристаллах $(\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x)\text{Te}_3$.



Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-20055, <https://rscf.ru/project/22-22-20055/>, при финансовой поддержке правительства Забайкальского края.

Литература

1. Гольцман Б.М., Кудинов В.А., Смирнов И.А. *Полупроводниковые термоэлектрические материалы на основе Bi_2Te_3* (М., Наука, 1972).

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЕ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ FSF-МИКРОМОСТИКОВ НА ОСНОВЕ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО НИОБИЯ И РАЗБАВЛЕННОГО ФЕРРОМАГНИТНОГО СПЛАВА Pd_{0.99}Fe_{0.01}

Шуравин^{1*} Н.С., Карелина¹ Л.Н., Больгинов¹ В.В.

¹*Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия,*

*shuravin@issp.ac.ru

Слоистые структуры сверхпроводник-ферромагнетик представляют большой интерес как для науки, так и для практических приложений. Спиновый антагонизм ферромагнетизма и сверхпроводимости приводит к ряду интересных физических явлений, связанных с возникновением пространственно-неоднородных состояний в F-слое и генерацией триплетной сверхпроводимости. В частности, может наблюдаться возвратная зависимость критической температуры от толщины F-слоя; гистерезисные кривые магнитосопротивления; зависимость критической температуры от угла взаимной ориентации магнитных моментов F-слоев в трехслойных FFS-структурах и т.д. Практический интерес к изучению слоистых FS-структур связан с возможностью реализации на их основе масштабируемых элементов сверхпроводниковой памяти. Действительно, изменение свойств таких объектов связано с влиянием магнитного состояния ферромагнетика на концентрацию носителей в сверхпроводнике. Поэтому запоминающие элементы на основе FSF- или SFF- мостиков (см. обзор в [1]) обладают большим потенциалом миниатюризации, в отличие от джозефсоновских элементов, чувствительных к потоку магнитного поля.

В наших предыдущих работах [2, 3] докладывалось о наблюдении гистерезисной кривой магнитосопротивления в микромостиках Pd_{0.99}Fe_{0.01}-Nb-Pd_{0.99}Fe_{0.01}. Эффект представлял собой отрицательные пики магнитосопротивления в полях около 10 Э, противоположных исходно намагниченному состоянию. Использованный сплав PdFe (с содержанием железа около 1% ат.) является на сегодняшний день слабым из магнитных материалов, применяемых в подобных экспериментах. Мы обнаружили, что воздействие магнитного состояния слоев Pd_{0.99}Fe_{0.01} на сверхпроводящий параметр порядка в слое ниобия сохраняется и вне границ сверхпроводящего перехода (точнее, при более низких температурах). Это проявляется в виде зависимости критического тока и формы вольт-амперной характеристики мостика от взаимной ориентации намагниченностей F-слоев. Как следствие, при низких температурах наблюдаются на порядок более сильные магниторезивные эффекты, что позволяет реализовать магнитные логические переключатели с амплитудой изменения напряжения в сотни микровольт. Минимальная рабочая температура реализованного элемента памяти составляет 0.93 T_c (при T_c=2.38 K), и определяется появлением гистерезиса на вольт-амперной характеристике из-за перегрева мостика в резистивном состоянии.

Литература

1. L. N. Karelina, R. A. Novhannisyanyan, I. A. Golovchanskiy [et al.] // J. Appl. Phys. – 2021. – Vol. 130. – P. 173901.
2. Л. Н. Карелина, В. В. Больгинов, Ш. А. Эркенов [и др.] // Письма в ЖЭТФ. – 2020. – Т. 112. – С. 743–748.
3. Л. Н. Карелина, Н. С. Шуравин, А. С. Ионин [и др.] // Письма в ЖЭТФ. – 2022. – Т. 116. – С. 108–115.

ДАТА-ОРИЕНТИРОВАННЫЙ АЛГОРИТМ ОЦЕНКИ ПОГРЕШНОСТИ МЕТОДА PIV

Дворников В. А.¹, Бражников М. Ю.²

¹НИУ ВШЭ, г. Москва, Россия, vadvornikov@edu.hse.ru

²ИФТТ РАН, г. Черноголовка, Россия, makc@issp.ac.ru

Particle Image Velocimetry (PIV) [1] — широко распространённый метод измерения поля скорости нестационарных течений жидкостей и газов. Для визуализация течения в жидкость подмешиваются мелкие пробные частицы. Подсвеченные лазерным листом частицы регистрируются на скоростную цифровую камеру. Поле скорости восстанавливается кросс-корреляционными алгоритмами по паре изображений пробных частиц, полученные в последовательные моменты времени [2]. Принципиальные ограничения кросс-корреляционных алгоритмов, оптические артефакты, неидельность пробных частиц, субъективность выбора параметров отбора ложных векторов скорости на этапе валидации PIV сказываются на погрешности определения скорости.

Мы предлагаем универсальный дата-ориентированный алгоритм оценки погрешности для произвольной функции поля скорости. Алгоритм реализован в виде модуля Python с использованием библиотек NumPy [3] и SciPy [4]. Корректность работы алгоритма проверена на примере кинетической энергии, ошибку для которой можно рассчитать аналитически. С помощью алгоритма оценена погрешность расчёта спектрального потока энергии по экспериментальным данным для квазидвумерного турбулентного течения в тонких жидких слоях.

Литература

1. Willert, C. E. and Gharib, M., Digital particle image velocimetry, *Experiments in Fluids*, vol. 10, 181–193 (1991) <https://doi.org/10.1007/BF00190388>
2. Alex Liberzon, Theo Käufer, Andreas Bauer, Peter Vennemann, & Erich Zimmer. (2021). OpenPIV/openpiv-python: OpenPIV-Python v0.23.4 (0.23.4). Zenodo. <https://doi.org/10.5281/zenodo.4409178>
3. Harris, C.R., Millman, K.J., van der Walt, S.J. et al. Array programming with NumPy. *Nature* 585, 357–362 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2>
4. Virtanen, P., Gommers, R., Oliphant, T.E. et al. SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python. *Nat Methods* 17, 261–272 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2>

ФЛУКТУАЦИИ СПЕКТРАЛЬНОГО ПОТОКА ЭНЕРГИИ В КВАЗИДВУМЕРНОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ

Бражников М. Ю.

Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка, Россия, maxc@issp.ac.ru

Колмогоровский спектр энергии статистически стационарной турбулентности $E(k) \sim \varepsilon^{2/3} k^{-5/3}$ определяется единственным параметром — потоком кинетической энергии по каскаду ε [1]. Крайчнаном теоретически показал [2], что в двумерной турбулентности Колмогоровский спектр описывает обратный каскад: в отличие от трёхмерной турбулентности в двумерном случае энергия переносится из мелкомасштабных пульсаций в крупномасштабные течения.

В данной работе экспериментально исследуется статистически стационарное квазидвумерное турбулентное течение индуцированное силой Лоренца в тонких слоях жидкого электролита. Скорость течения на поверхности жидкости измеряется методом PIV (particle image velocimetry) [3, 4]. Эксперименты проводились в диапазоне чисел Рейнольдса от $Re = 20$ до $Re = 250$. Число Рейнольдса определяется по среднеквадратичной скорости течения и масштабу накачки. Фильтрацией пространственных Фурье-гармоник двумерное поле скорости разделяется на две компоненты, поток энергии рассчитывается через взаимодействие мелкомасштабной и крупномасштабной компонент поля скорости [5].

Обнаружено, что в обратном каскаде квазидвумерной турбулентности поток энергии, рассчитанный по мгновенной скорости, флуктурует во времени, причём с увеличением числа Рейнольдса относительная амплитуда флуктуаций увеличивается. Среднее значение потока энергии ε демонстрирует скейлинг по числу Рейнольдса с показателем степени 2.75 ± 0.05 , а стандартное отклонение для флуктуаций потока — с показателем степени 3.4 ± 0.1 .

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, грант № 075-15-2022-1099.

Литература

1. Колмогоров А.Н., Локальная структура турбулентности в несжимаемой жидкости при очень больших числах Рейнольдса, Доклады Академии наук СССР, 30 № 4, 99–102 (1941)
2. Robert H. Kraichnan, Inertial Ranges in Two-Dimensional Turbulence, Phys. Fluids 10, 1417–1423 (1967) <https://doi.org/10.1063/1.1762301>
3. Willert, C. E. and Gharib, M., Digital particle image velocimetry, Experiments in Fluids, vol. 10, 181–193 (1991) <https://doi.org/10.1007/BF00190388>
4. Alex Liberzon, Theo Käufer, Andreas Bauer, Peter Vennemann, & Erich Zimmer. (2021). OpenPIV/openpiv-python: OpenPIV-Python v0.23.4 (0.23.4). Zenodo. <https://doi.org/10.5281/zenodo.4409178>
5. Gregory L. Eyink, Local energy flux and the refined similarity hypothesis. J Stat Phys 78, 335–351 (1995) <https://doi.org/10.1007/BF02183352>

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОГЕРЕНТНЫХ ГЕОСТРОФИЧЕСКИХ ВИХРЕЙ

Тумачев Д. Д.^{1,2}, Филатов С. В.^{1,2}, Вергелес С. С.², Левченко А. А.¹

¹Институт физики твёрдого тела РАН, Черногловка, Россия,
d.tumachev@issp.ac.ru

²Институт теоретической физики имени Ландау РАН, Черногловка, Россия

Были проведены эксперименты с турбулентностью во вращающемся сосуде. В такой системе возникала сила Кориолиса, подавляющая вертикальные градиенты скоростей. Турбулентность создавалась вращающимися лопатками. Система двумеризовалась и в ней возникали столбовые вихри, т.е. они вытянуты от дна до крышки сосуда. Изменяя частоту вращения, был обнаружен переход от одного турбулентного режима к другому с границей перехода 0.35 об/с. Статистические свойства этих режимов значительно отличаются друг от друга. Режимы отличаются количеством вихрей, и их энергией, заключённых в них. Анализ полученных вихрей показал, что при достижении микрочисла Россби > 1 , возникает этот переход. Сам вихри становились крупнее, и их профиль азимутальной скорости $U_G^\varphi(r)$ и величины $\omega_G(r) = \langle \omega_i(r, \varphi, t) \rangle_{\varphi, t, N} \cdot r$, где усреднение производилось по углу, времени и отслеженным вихрям, схож с профилем в теоретической модели, предложенной в [1].

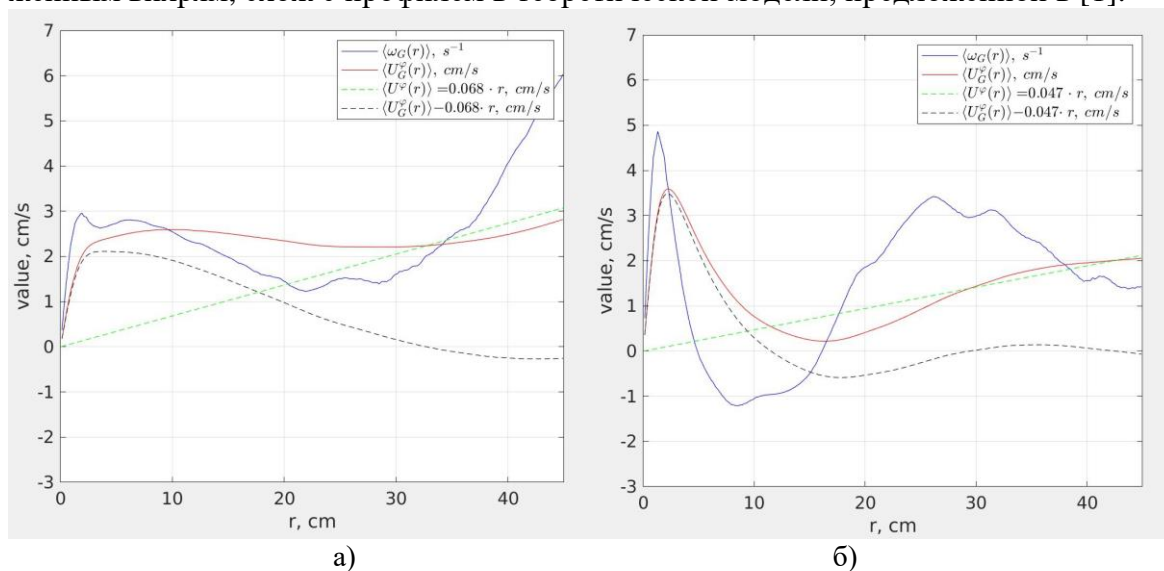


Рис.3. Профили азимутальной скорости вихря $U_G^\varphi(r)$ (красная линия), величины $\omega_G(r) = \langle \omega_i(r, \varphi, t) \rangle_{\varphi, t, N} \cdot r$ (синяя линия), величина аппроксимации профиля скорости среднего течения $U^\varphi(r) = \mathcal{G} \cdot r$ (прямая синяя пунктирная линия), профиль азимутальной скорости с вычтенным профилем скорости среднего течения $U_G^\varphi(r) - U^\varphi(r)$ (чёрная пунктирная линия). а) Низкая скорость вращения 0.12 об/с, б) высокая скорость вращения 0.72 об/с.

Литература

1. Parfenyev V.M., Vergeles S.S. Influence of Ekman friction on the velocity profile of a coherent vortex in a three-dimensional rotating turbulent flow // Phys. Fluids. 2021. Т. 33, № 11. С. 115128.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛИПАНИЯ ПРОБНЫХ ЧАСТИЦ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ ПО ВОЛНОВОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ

Лузенина С.А.¹, Левченко А.А.²

¹Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка, Россия, luzeninasa@issp.ac.ru

²Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка, Россия, levch@issp.ac.ru

Данное исследование посвящено теоретическому расчёту взаимодействия частиц на поверхности жидкости с образованием кластеров. Для проведения расчётов была написана программа на языке Python, вычисляющая изменения местоположений частиц под действием сил электростатического притяжения.

При использовании данной программы в качестве вводных данных фигурируют диаметр и количество частиц, равная для них величина заряда, число итераций, длина шага по времени и динамический коэффициент вязкости жидкости. Начальное местоположение каждой частицы определяется случайным образом, а затем вычисляются расстояния между каждыми двумя частицами и силы взаимодействия, образующие равнодействующую силу для каждой частицы. После каждого шага по времени определяются перемещения частиц под действием равнодействующих сил и их новые положения. При сближении двух частиц на расстояние, приблизительно равное их диаметру, происходит слипание этих частиц и прекращение их движения относительно друг друга.

Для каждого рассматриваемого момента времени рассчитывалось среднее расстояние между частицами. Как и предполагалось, по мере слипания частиц оно уменьшается.

Была также написана версия программы, где величина заряда каждой частицы определялась случайным образом. Результаты расчётов качественно схожи, что соответствует предварительным предположениям.

Пример уменьшения среднего расстояния между частицами с течением времени представлен на графике, изображённом на рис. 1.

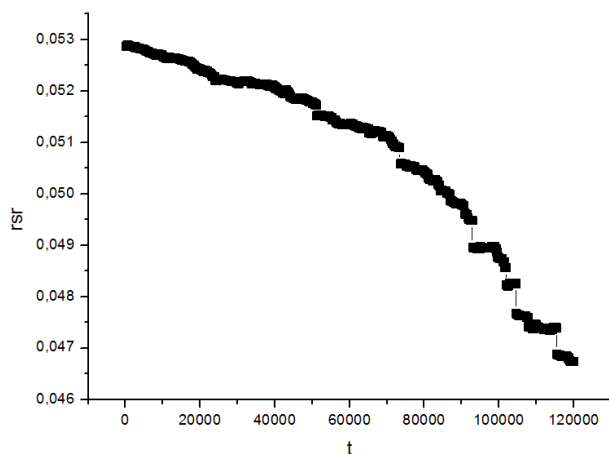


Рис 1.

Текущим результатом работы является успешно функционирующая программа, производящая расчёты межчастичного притяжения и последующего слипания заряженных частиц с учётом вязкости жидкости. Ведётся дальнейшая работа над версиями программы для расчётов взаимодействий, более приближенных к условиям реального эксперимента.

ГЕНЕРАЦИЯ ВИХРЕВОГО ДВИЖЕНИЯ ВОЛНАМИ НА ПОВЕРХНОСТИ МЕЛКОЙ И ГЛУБОКОЙ ВОДЫ

С.В. Филатов, А.В. Поплевин*, Д.Д. Тумачев, А.А. Левченко, Л.П. Межов-Деглин

*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, 142432
Россия*

**e-mail: faraldos@issp.ac.ru*

Выполнены экспериментальные исследования процессов формирования вихревого движения на поверхности мелкой и глубокой воды, генерируемого двумя волнами частотой 6 Гц, распространяющимися на поверхности под углом 90° [1]. Эксперименты проводились в стеклянной ванне размером 70x70 см. Глубина воды изменялась от 2 см до 19 см. В работе [2] было установлено, что при одинаковых условиях возбуждения волн на поверхности мелкой воде формируется один большой вихрь и несколько смазывающих, а на поверхности глубокой воды формируются несколько больших вихрей с завихренностью разного знака. Показано, что в установившемся режиме значения завихренности и энергии вихревого движения хаотически изменяются вблизи некоторого среднего значения. PDF распределения значений завихренности и энергии близки к Гаусовым на 19 секунде накачки, но существенно деформируются к 900 секунде в результате формирования на поверхности воды крупномасштабных вихрей.

После достижения стационарного состояния в вихревой системе накачка волн выключалась на 1200 секунде, и регистрировалось затухание поверхностного течения. На поверхности мелкой воды, зависимость от времени энергии вихревого течения $E_{\text{вих}}(t)$ описывается экспоненциальной функцией при всех уровнях накачки, а зависимости завихренности $\Omega(t)$ имеет экспоненциальную зависимость только в диапазоне волновых векторов $0 - 0.2 \text{ см}^{-1}$. На поверхности глубокой воды зависимости $E_{\text{вих}}(t)$ близки к экспоненциальным только при наименьших амплитудах накачки, а зависимость $\Omega(t)$ близка к экспоненциальной также в диапазоне волновых чисел $0 - 0.2 \text{ см}^{-1}$, но только при наименьшем уровне накачки. При высоких уровнях накачки зависимости $E_{\text{вих}}(t)$ и $\Omega(t)$ немонотонны, что можно связать с влиянием объемных течений.

1. Filatov S.V., Aliev S.A., Levchenko A.A., Khramov D.A. // JETP Letters, 2016, V. 104, p. 702-708.
2. Филатов С.В., Поплевин А.В. и др. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2022, № 12, стр. 53-64.

КОЛОРИМЕТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИСПЕРСИЙ СФЕРИЧЕСКИХ КРЕМНЕЗЁМНЫХ ЧАСТИЦ В РАСТВОРЕ ГЛИЦЕРИН-ВОДА

Сухинина Н. С., Масалов В. М., Емельченко Г. А.
ИФТТ РАН, г. Черногловка, Россия, masalov@issp.ac.ru

Полые сферические частицы из диоксида кремния субмикронных размеров находят всё более разнообразные применения из-за уникального сочетания физико-химических свойств: термической и механической стабильности, низкой плотности, высокой биосовместимости, возможности функционализации поверхности. Одним из перспективных направлений является применение таких частиц с непроницаемой для жидких сред оболочкой в качестве пигмента для замены TiO_2 в пищевой и фармацевтической промышленности.

В работе представлены результаты измерения показателей белизны суспензий (1 масс. %) полых сферических частиц диоксида кремния, отожжённых при $600\text{ }^\circ\text{C}$ 4 часа, и частиц SiO_2 диаметром 260 нм, синтезированных модифицированным методом Штобера, в растворе глицерин-вода в диапазоне концентраций глицерина (рис. 1)

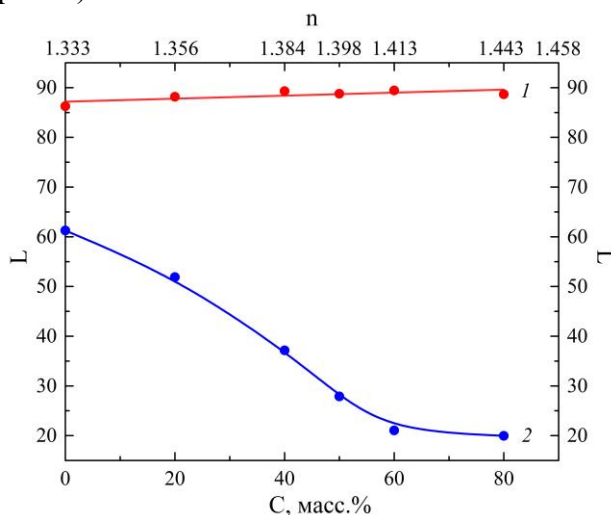


Рис. 1. Зависимости величины белизны суспензий L полых (1) и сплошных пористых (2) частиц диоксида кремния от концентрации глицерина.

Показатель преломления среды при этом изменяется в диапазоне 1.33-1.44. Эффективный показатель преломления полых частиц диоксида кремния зависит от соотношения объёмных долей кремнезёмной оболочки и воздуха, заключённого внутри частицы. При диаметре полых частиц ~ 350 нм и толщине оболочки ~ 25 нм их эффективный показатель преломления равен 1.19, и разница между величинами эффективного показателя преломления полых частиц и показателя преломления среды увеличивается с ростом концентрации глицерина в диапазоне 0.14-0.27. Поровое пространство сплошных частиц, не подвергнутых термообработке, составляет 15-20 об.% и доступно для воды, оставаясь недоступным для более крупномолекулярных жидкостей. Показатель преломления частиц SiO_2 , наполненных водой из водного раствора глицерина, составлял ~ 1.43 . По мере роста показателя преломления жидкой среды разница между ним и величиной эффективного показателя преломления частиц уменьшается, и величина белизны (L) суспензии падает от ~ 60 до ~ 20 . Величина белизны суспензии полых частиц остаётся практически постоянной (с тенденцией к небольшому увеличению), достигая почти 90%.

Различие хода зависимостей (1) и (2), представленных на рис. 1, доказывает непроницаемость для водных растворов полых частиц диоксида кремния, отожжённых при $600\text{ }^\circ\text{C}$, и показывает перспективность использования полых частиц в качестве пигмента в жидких средах. Белизна полых частиц в сухом порошке сопоставима с белизной белых пигментов на основе диоксида титана ($L > 96$)

Исследование выполнено в рамках государственного задания ИФТТ РАН.

ЭВОЛЮЦИЯ ВИХРЕВОГО ТЕЧЕНИЯ НА СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ СЛОЯ НОРМАЛЬНОГО ГЕЛИЯ ПРИ ТЕРМОЦИКЛИРОВАНИИ

А.А. Левченко^{1,2}, Л.П. Межов-Деглин^{1,2}, А.А. Пельменёв^{1,2,3}

¹ИФТТ РАН имени Ю.А. Осипьяна, Черноголовка, 142432, Россия

²ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, Черноголовка, 142432, Россия

³Филиал Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук в г. Черноголовке; Черноголовка, 142432, Россия

Обнаружено, что возникновение термоактивированной конвекции Рэлея-Бенара в объеме нагреваемого сверху слоя нормального гелия He-I в широкой цилиндрической ячейке сопровождается возбуждением вихревого течения на свободной поверхности слоя. Наблюдения за динамическими явлениями на поверхности слоя гелия глубиной порядка нескольких сантиметров при термоциклировании в интервале температур от 2.0 до 2.5 К позволяют в одном эксперименте изучать возбуждение, эволюцию и затухание вихревых течений на поверхности одного и того же слоя вязкой жидкости в приближениях «глубокой» и «мелкой» воды.

Литература

1. Пельменев А.А., Левченко А.А., Межов-Деглин Л.П. //Письма в ЖЭТФ – 2019. - **110**, вып. 8, - С. 545-550 DOI: 10.1134/S0370274X19200062.
2. A.A. Pelmenev, A.A. Levchenko, L.P. Mezhev-Deglin. // Low Temp. Phys. - 2020.- 46, P. 133140; <https://doi.org/10.1063/10.0000531>
3. A.A. Pelmenev, A.A. Levchenko, L.P. Mezhev-Deglin//, Journal of Low Temperature Physics – 2021. - **205**(5-6) – P. 200-211.
4. A.A. Pelmenev, A.A. Levchenko, L.P. Mezhev-Deglin, Materials 14, 7514 (2021). <https://doi.org/10.3390/ma14247514>.
5. Пельменев А.А., А.А. Левченко А.А., Межов-Деглин Л.П. //, ЖЭТФ – 2023. - 163(4) - С. 545-560

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ

Масалов В. М., Сухинина Н. С., Емельченко Г. А.
ИФТТ РАН, г. Черногоровка, Россия, masalov@issp.ac.ru

Монодисперсные сферические частицы диоксида кремния субмикронных размеров обычно получают гидролизом эфиров кремниевой кислоты (золь-гель процесс). Полученные частицы представляют собой фрактальные структуры с системой пор различного размера. Структура частиц определяет их свойства, такие как плотность, пористость, удельная поверхность, сорбционная ёмкость и показатель преломления. В работе представлены результаты исследований зависимости структуры и структурных свойств наночастиц кремнезёма от условий их синтеза.

Для получения наночастиц кремнезёма мы использовали два метода: гетерогенный синтез с использованием аминокислот в качестве катализатора и гомогенный синтез в спирто-водно-аммиачной среде, известный как метод Штобера-Финка-Бона (ШФБ). При выращивании частиц многоступенчатым методом ШФБ условия синтеза изменяли таким образом, чтобы получить приближение к двум моделям роста частиц: «агрегационной» и «модели молекулярного роста». В результате были получены частицы с различной структурой. Плотность и пористость частиц были изучены методом гидростатического взвешивания с использованием двух пикнометрических жидкостей с разным кинетическим диаметром молекул.

Было установлено, что при использовании крупномолекулярных жидкостей (таких как, метилметакрилат, тетраэтоксисилан и другие) можно непосредственно измерять плотность частиц кремнезёма, упакованных в структуры (компакты). Использование жидкости с малым диаметром молекул (вода) позволяет оценить общую и закрытую пористость частиц. Было установлено, что в случае гомогенного гидролиза ТЭОС в зависимости от условий синтеза плотность исходных частиц кремнезёма диаметром 200-300 нм варьируется в диапазоне от 1,7 до 1,9 г/см³, пористость 18-23,5% об., показатель преломления 1,37-1,40. В случае гетерогенного гидролиза ТЭОС плотность частиц диаметром 300 нм составляет величину 2,0-2,1 см³/г, пористость 5-10% об., показатель преломления 1,42-1,44. Исследованы зависимости плотности, пористости, удельного объёма пор частиц кремнезёма от температуры отжига в интервале температур 200-1000 °С.

Исследование выполнено в рамках государственного задания ИФТТ РАН.

ХЛАДНОЛОМКОСТЬ МЕТАЛЛОВ КАК СТРУКТУРНЫЙ МНОГОСТАДИЙНЫЙ ДИСЛОКАЦИОННЫЙ ПРОЦЕСС

Чернов В.М.^{1,2}

¹Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени академика А.А. Бочвара (АО «ВНИИНМ»), Москва, Россия.

²Национальный Исследовательский Ядерный Университет МИФИ (НИЯУ МИФИ), Москва, Россия.

email: soptimizmom@mail.ru

Рассмотрена хладноломкость металлов (хрупкое разрушение при низких температурах и внешних напряжениях меньше пределов текучести) в условиях «до – в процессе – после» облучения в ядерных и термоядерных реакторах. Определены условия и механизмы хладноломкости металлов (изделий) в зависимости от типа их кристаллических решёток, состояний равновесности структур (квазиравновесных «до-после» облучения, неравновесных динамических «в процессе» облучения), напряжённых состояний и физико-механических свойств (упругости, прочности) при внешних воздействиях (температура, напряжение, реакторное облучение). Хладноломкость металлов возникает при определённых соотношениях критических напряжений на фронте трещины (концентраторе внешнего напряжения) для деформационного двойникования, сдвига и отрыва металла. Хладноломкость формируется, если одновременно с возникновением локальной концентрации напряжений (фронт докритической трещины) не происходит их пластическая (дислокационная) релаксация. Релаксация напряжения на фронте докритической трещины останавливает её рост (хладноломкость не формируется). Энергия дефекта упаковки металла определяет критический уровень напряжения для начала его релаксации механическим двойникованием на фронте трещины. Для формирования хладноломкости металлов необходимы высокие энергии дефекта упаковки, при которых критическое напряжение деформационного двойникования превышает критические напряжения сдвига и отрыва.

Механизмы хладноломкости являются дислокационными и определяют хладноломкость как структурный многостадийный процесс. Определены механизмы и стадии хладноломкости. Упрочнение хладноломких металлов (блокировка дислокаций) усиливает их хладноломкость (повышение температуры вязко-хрупкого перехода). В облучённых («после» облучения) металлах (хладноломких «до» облучения) расширяется температурная область хладноломкости (повышается температура вязко-хрупкого перехода). «В процессе» реакторного (нейтронного, гамма) облучения металлов (неравновесное состояние структуры) хладноломкость не формируется. Гамма облучение оказывает существенное влияние на свойства металлов, включая хладноломкость (подавление).

МЕХАНОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ И ОПТИЧЕСКИ СТИМУЛИРОВАННАЯ АНТИСТОКСОВАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КОМПОЗИТА НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРА И ПОРОШКА ЛЮМИНОФОРА

Банишев А.Ф.

Институт проблем лазерных и информационных технологий Российской академии наук – филиал Федерального научно-исследовательского центра «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук, Московская обл., г.Шатура, E-mail:

banishev@mail.ru

Исследование поведения материалов, подвергающихся воздействию тепловых и механических нагрузок представляет большой интерес для обеспечения безопасности эксплуатации различных конструкций, устройств и машин. Для практического использования важна информация о зависимости деформации от внешних нагрузок, а также о критических нагрузках приводящих к разрушению материала. В связи с этим возникает необходимость в разработке надежных и информативных методов диагностики напряжений и деформаций в материалах, подвергающихся воздействию внешних сил. К известным устройствам и методам, обычно используемым для измерения напряжений и деформаций, относятся тензодатчики, фотоупругие покрытия, метод корреляции цифровых изображений и интерференционные методы. В последнее время большой интерес проявляется к исследованию механолюминесцирующих (МЛ) материалов (механолюминофоров) и созданию на их основе новых типов приборов и устройств механо-пьезо-фотоники. Механолюминофоры хорошо люминесцируют при механических воздействиях, что может быть использовано для визуализации напряжений и деформаций материалов. К настоящему времени получены механолюминофоры на основе оксидов редкоземельных элементов, которые эффективно механолюминесцируют в видимом и ближнем инфракрасном спектре. Особый интерес представляют механолюминофоры механолюминесцирующие в результате упругих деформаций в широком диапазоне нагрузок, а интенсивность механолюминесценции пропорциональна величине деформаций.

В данной работе исследовались кинетика и спектр фотолюминесценции механолюминесцирующих композиционных материалов на основе полимера и мелкодисперсного порошка люминофора $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Eu}^{2+}, \text{Dy}^{3+}$ при комбинированном воздействии коротковолнового и длинноволнового излучений лазеров. Исследовалась механолюминесценция указанных материалов при воздействии мощного лазерного импульса и механического удара. Показано, что на образцах предварительно облученных коротковолновым лазерным излучением ($\lambda=405 \text{ nm}$), при воздействии на них длинноволнового лазерного излучения ($\lambda=1.06 \mu\text{m}$) наблюдается оптически стимулированная антистоксовая люминесценция (ОСАЛ). Показано, что ОСАЛ и механолюминесценция обусловлены активацией одних и тех же электронных уровней ловушек (уровней ионов Dy^{3+}) заселенных воздействием коротковолнового лазера: только в первом случае активация происходит за счет поглощения кванта излучения лазера, а во втором случае за счет сдвига уровней ловушек в сторону зоны проводимости при деформации материала. Исследовалось распространение тепла, распределение деформаций и разрушение металлических пластин при воздействии мощных лазерных импульсов и при механическом ударе. Для визуализации распространения тепла и распределения деформаций использовался исследуемый композиционный механолюминесцирующий материал нанесенный на поверхность пластин. Показано, что пространственное распределение интенсивности свечения механолюминесцирующего слоя и скорость ее изменения с хорошим пространственным и временным разрешением визуализируют распространение тепла и деформации в материалах при механическом ударе и при воздействии мощных лазерных импульсов.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИНЖЕКТИРОВАННЫХ ЗАРЯДОВ С КВАНТОВЫМИ ВИХРЯМИ В СВЕРХТЕКУЧЕМ ГЕЛИИ ВБЛИЗИ СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

И.А.Ремизов^{1,2}, М.Р.Султанова^{1,2}, А.А.Левченко^{1,2}, Л.П. Межов-Деглин^{1,2}

¹Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, 142432 Россия

²Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН Черноголовка, 142432

Экспериментально исследовано движение инжектированных в сверхтекучий He-II отрицательных зарядов (электронных пузырьков диаметром ~ 1.7 нм) под поверхностью с вихревым движением [1], формируемым стоячими волнами с частотой $\omega/2\pi = 49,88$ Гц в квадратной ячейке размерами 5x5 см в статических электрических полях. О направлении движения инжектированных зарядов в He-II судили по распределению токов, регистрируемых вертикально ориентированными сегментами приемного коллектора, который был расположен на противоположной от точечного источника зарядов стенке ячейки. Обнаружено, что генерация завихренности приводит к перераспределению тока на сегментах коллектора. Изменение траектории движения зарядов от источника к приемному коллектору обусловлено их взаимодействием с вихревым потоком нормальной составляющей. Возбуждение стоячих капиллярных волн на поверхности He-II в ячейке, нелинейное взаимодействие между которыми приводит к генерации вихрей на поверхности и в объеме слоя жидкости [2], заметно изменяет распределение токов отрицательных зарядов по сегментам коллектора.

Литература

1. Remizov, I.A. The interaction between injected charges and a vortex flow in normal and superfluid helium near $T\lambda$ / I.A. Remizov, M.R. Sultanova, A.A. Levchenko, L.P. Mezhov-Deglin // Low Temperature Physics/Fizika Nizkikh Temperatur. – 2021. – Vol. 47, Iss. 5. – P. 378–382/409–413
2. Filatov, S.V. Generation of Vortices by Gravity Waves on a Water Surface / S.V. Filatov, S.A. Aliev, A.A. Levchenko, D.A. Khramov // JETP Letters. – 2016. – Vol. 104, № 10. – P. 702–708.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СИНТЕЗА ПОКРЫТИЙ, СОДЕРЖАЩИХ БОР И АЛЮМИНИЙ, МЕТОДАМИ ХИМИКО-ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ И ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВОГО ЛЕГИРОВАНИЯ

Мишигдоржийн У.Л.¹, Семенов А.П.¹, Улаханов Н.С.^{1,2},
Мархадаев Б.Е.¹, Дышенов Б.А.¹

¹Институт физического материаловедения СО РАН,
Улан-Удэ, Российская Федерация, undrakh@ipms.bscnet.ru

²Восточно-Сибирский государственный университет технологий и управления,
Улан-Удэ, Российская Федерация, nulahanov@mail.ru

Синтез покрытий, содержащих бор и алюминий, как метод инженерии поверхности позволяет в значительной мере повысить износо-, жаро- и коррозионную стойкость, снизить коэффициент трения и увеличить сопротивление износу поверхности изделий деталей машин [1,2]. Представляет значительный научный и практический интерес разработка новых подходов формирования бороалитированных покрытий методами химико-термической и электронно-пучковой обработки и легирования поверхности. Не в полной мере ясны механизмы формирования различных структур, содержащих бор и алюминий при воздействии интенсивного ускоренного пучка электронов. Сведения о связи параметров химико-термической и электронно-пучковой обработки (температура, мощность, длительность обработки) со структурой и свойствами поверхностных слоев носят фрагментированный характер, не позволяющий провести систематизацию и прогнозирование.

Перечисленные проблемы определили цель настоящей работы, заключающейся в разработке методик повышения эксплуатационных характеристик изделий из углеродистых и легированных сталей путем рационального выбора технологии воздействия, параметров и составов защитных, содержащих бор и алюминий покрытий. Для достижения поставленной цели рассматривается комплекс теоретических исследований, базирующихся на массиве экспериментальных данных. Так, для обработки полученных экспериментальных данных в работе используется математический аппарат искусственных нейронных сетей и разработка компьютерной системы по выбору технологии создания покрытия и выявление технологических режимов для достижения требуемых свойств поверхности изделий из углеродистых и легированных сталей. Кроме математического моделирования приведены термодинамические расчеты с применением комплекса Tegra, включающие исследование кинетики формирования покрытий и расчет температурных полей методом конечных элементов при электронно-пучковой обработке. Результаты исследований создадут предпосылки для разработки методов имитационного компьютерного моделирования, позволят заложить научные основы формирования и прогнозирования параметров покрытий, в частности, бороалитированных.

Финансирование: Исследование выполнено при финансовом обеспечении гранта Российского Научного Фонда (проект 19-79-10163-П)

Литература

1. Ouladsaad S., Allaoui O., Daas A. // Indian Journal of Chemical Technology. – 2019. – V. 26. – P. 239-243.
2. Xu Xiaojing, Jiang Ze, Tabie Vitus, Niu Tianqing, Mao Qiang, Zhang Tianci, Wang Hao and ZhuChenYu // Materials Research Express. – 2019. – V. 6. – № 9. – 096582.

ВЛИЯНИЕ Cr НА ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В СИСТЕМЕ In/Si(111)

Л. В. Бондаренко¹, А. Ю. Тупчая¹, Ю. Е. Вековшинин¹, Д. В. Грузнев¹, Д. А. Олянич¹, Т. В. Утас¹, А. Н. Михалюк^{1,2}, А. В. Зотов¹ и А. А. Саранин¹

¹Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН, Владивосток

²Институт наукоемких технологий и передовых материалов, ДВФУ, Владивосток

В последнее время растет интерес к фазовым переходам в квазиодномерных системах металлических цепочек атомов на поверхности полупроводников. Интерес к таким системам связан с возможностью наблюдения фазовых переходов с нарушением симметрии в реальном пространстве с помощью сканирующего туннельного микроскопа (СТМ).

Поверхность Si(111)-4x1-In представляет собой удобный объект для изучения роли примесных дефектов в явлении фазового перехода. Эта поверхность состоит из массива цепочек атомов In и содержит один монослой этих атомов ($1,0 \text{ MC} = 7,8 \times 10^{14} \text{ см}^{-2}$). При комнатной температуре (КТ) поверхность демонстрирует квазиодномерную металлическую зонную структуру с периодичностью 4×1 [1], но при охлаждении до низких температур ниже $\sim 130 \text{ K}$ она претерпевает фазовый переход в диэлектрическую структуру с периодичностью 8×2 [1]. В экспериментах было обнаружено, что малые количества примесей, введенные на поверхность, влияют на фазовый переход. Большинство примесей, исследованных до сих пор (Na, Pb, In) [2,3,4,5], уменьшают температуру перехода (T_c), за исключением кислорода, который увеличивает T_c [4]. Уменьшение T_c может быть приписано ряду причин, а именно подавлению дальнего порядка примесными дефектами [4, 5], усиленному рассеянию в потенциальных ямах [3], а также электронному легированию [2].

В настоящей работе, используя низкотемпературные измерения с помощью методов СТМ и дифракции медленных электронов, мы исследовали влияние адсорбированных атомов Cr на структурный переход 4×1 - 8×2 на поверхности In/Si(111). Для атомов хрома характерно сильное взаимодействие с кремнием, что позволяет ему встраиваться в плотные металл-кремниевые реконструкции. Перспективной особенностью хрома является то, что это магнитный материал. Эксперименты показали, что атомы Cr встраиваются в решетку Si(111)-4x1-In, вызывая локальное удвоение периода вдоль рядов атомов In. Было установлено, что адсорбированный Cr снижает температуру перехода T_c и при определенной концентрации Cr поверхность сохраняет структуру 4×1 вплоть до минимальной температуры 20 K, достижимой в эксперименте.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-12-00174, <https://rscf.ru/project/22-12-00174/>.

Литература

1. H. W. Yeom, S. Takeda, E. Rotenberg et al. // Phys. Rev. Lett. 82 (24) (1999) 4898–4901.
2. H. Shim, S. Y. Yu, J. Y. Koo, G. Lee // Appl. Phys. Lett. 94 (2009) 231901–3.
3. S. Lee, J. Woo, G. Lee // J.Korean Phys.Soc. 70 (2017) 740–744.
4. T. Shibusaki, N. Nagamura, T. Hirahara et al. // Phys. Rev. B 81 (3) (2010) 035314–6.
5. W. Lee, H. Shim, G. Lee // J.Korean Phys.Soc. 56 (2010) 943–946.

ТОПОЛОГИЯ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА WC/CO В ТВЁРДЫХ СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ КАРБИДА ВОЛЬФРАМА

Каграманян Д. Г.^{1,2}, Константинова Е. П.^{1,2}, Дружинин А. В.¹, Страумал Б. Б.¹

¹Научный центр РАН в Черногловке, Институт физики твердого тела РАН им.

Ю.А. Осипьяна, Черногловка, Россия, straumal@issp.ac.ru

²Высшая школа экономики, Москва, Россия

23 марта 1923 года в Германии был зарегистрирован первый патент на твёрдые сплавы на основе карбида вольфрама с кобальтовой связкой [1]. Для дальнейшего развития таких сплавов требуются новые методы описания их микроструктуры, выходящие за пределы традиционных подходов количественной металлографии. В данной работе предложен принципиально новый подход к описанию микроструктуры этих материалов, а именно – топологии границ раздела WC/Co в твёрдых сплавах на основе карбида вольфрама с кобальтовой связкой с помощью элементов компьютерного зрения.

В работе были изготовлены модельные срезы образцов, имитирующих обычные коммерческие твердые сплавы WC-Co. Полученные срезы подвергали микроскопическому исследованию с помощью растровой электронной микроскопии (РЭМ). Вычисление углов на межфазной границе между карбидом вольфрама и кобальтовой связкой было основано на скалярном произведении. Для каждого из трех образцов было обработано по сто микрофотографий и на рисунке 1(а) была построена гистограмма углов на межфазной границе кобальтовой связки и карбида вольфрама. Для определения ширины и длины областей кобальтовой связки опишем эллипс вокруг регионов кобальта при помощи алгоритма Хачияна [2]. На основе полученных длин малых и больших полуосей построим для крупных зерен тепловую карту распределения вероятности двумерной величины и нанесем на нее полином, проходящий по наиболее “теплым” пикселям

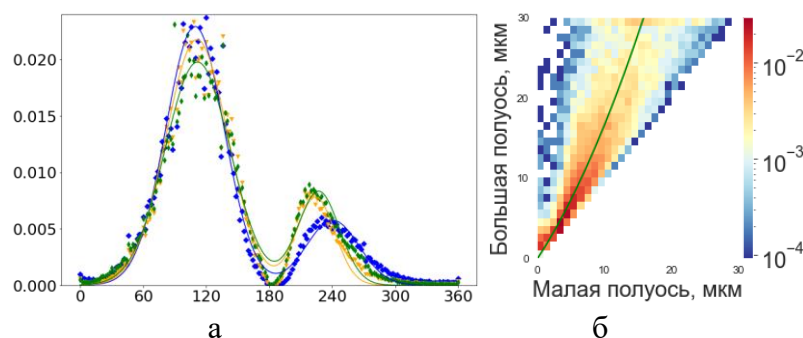


Рисунок 1. (а) Распределение углов на контуре регионов кобальтовой связки для трех образцов с разным размером зерен WC. Зеленый цвет – крупные зерна, синий – средние зерна, оранжевый – мелкие зерна. (б) Тепловая карта распределения вероятности длин больших и малых полуосей

Литература

1. K. Schröter, DRP 420.689: Sintered hardmetal alloy and procedure for its fabrication, 1923.
2. L.G. Khachiyan, Rounding of Polytopes in the Real Number Model of Computation. Mathematics of Operations Research (1996).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 22-22-00511, <https://rscf.ru/project/22-22-00511/>

СИНТЕЗ FeCo НАНОПРОВОЛОК КАЛИБРОВАННОГО РАЗМЕРА В ПОЛИМЕРНЫХ МАТРИЦАХ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ИХ НАГРЕВА ПЕРЕМЕННЫМ МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

Комарова С. О.¹, Хайретдинова Д. Р.^{1,2}, Долуденко И. М.², Панина Л. В.¹, Загорский Д. Л.²

¹Университет МИСИС, Москва, Россия, hairtdr@gmail.com

²ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

Исследование использования ферромагнитных наноструктур в качестве терапевтических агентов показало их перспективность для биомедицинских приложений, например, для разрушения раковых опухолей. Внедрение таких структур в организм в месте локализации онкологии и дальнейший нагрев переменным магнитным полем в течение времени позволяет провести подконтрольную терапию.

Для регулирования температуры необходимо задание определённых магнитных параметров. Так, изменение коэрцитивной силы (H_c), достигалось регулировкой состава и аспектного отношения вытянутых структур - нанопроволок (НП). В данной работе исследована зависимость магнитных свойств и мощности нагрева массива НП от их аспектного отношения. Массивы НП были получены методом матричного синтеза в трековых мембранах из ПЭТФ. Методом подбора был выбран состав $Fe_{0,92}Co_{0,08}$. Для синтеза были взяты матрицы с нестрого ориентированными порами (средний наклон 10 градусов) двух разных диаметров – 100 и 65 нм, с плотностями пор $1,2 \cdot 10^9$ пор/см² и $4,5 \cdot 10^9$ пор/см² соответственно. Синтез на проведен методом электрохимического осаждения с использованием двухэлектродной схемы в потенциостатическом режиме. В состав используемого электролита входили ионы Fe^{2+} и Co^{2+} в требуемой пропорции.

Исследование магнитных свойств проведено методом вибрационной магнитометрии (рис. 1). H_c увеличивается с длиной нелинейно в образцах обоих диаметров. Нагрев НП проводился с использованием генератора переменного магнитного поля. Контроль температуры проводился с помощью инфракрасной камеры. Мощность нагрева возрастает с длиной НП, она имеет более высокие значения у НП 100 нм. Кривые нагрева (рис.2) показали зависимость получаемой температуры от параметров НП. Коэффициенты эффективности нагрева вычислялись по первому участку кривых, на втором участке температура выходила на плато.

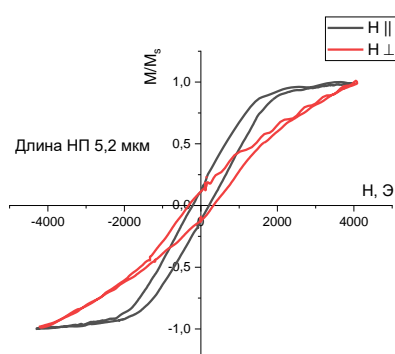


Рис 1 Петли гистерезиса массива НП

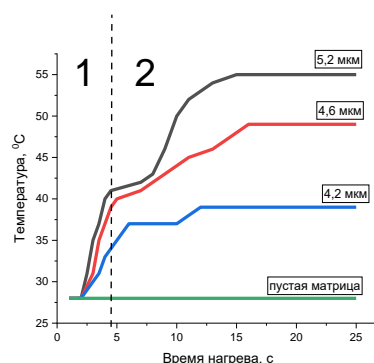


Рис 2 Графики нагрева НП с разной длиной

Работа выполнена в рамках Госзадания ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» и на базе Университета МИСИС.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ НЕОДНОРОДНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ С ПОМОЩЬЮ ТРАНСПОРТНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ

П.Д. Григорьев^{1,2}, В.Д. Кочев², А.А. Синченко³, А.В. Фролов³, А.П. Орлов³

¹*Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Черноголовка, Россия*

E-mail grigorev@itp.ac.ru

²*НИТУ «МИСиС», Москва, Россия*

³*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова, Москва, Россия*

Наблюдаемое часто анизотропное падение сопротивления выше T_c , с максимальным эффектом вдоль оси наименьшей проводимости, не описываемое стандартной теорией флуктуаций [1], мы объясняем неоднородным сверхпроводящим состоянием и описываем в приближении эффективной среды [2], обобщенном нами на анизотропные проводники [3-6]. Это позволяет определять на основе данных о температурной зависимости анизотропии сопротивления объемную долю сверхпроводящей фазы и усредненное отношение размеров сверхпроводящих островков вдоль главных осей кристалла. Данные о диамагнитном отклике вместе с транспортными измерениями позволяют оценить размер сверхпроводящих островков.

Еще больше информации о неоднородном сверхпроводящем состоянии дает анизотропия перехода в нулевое сопротивление, наблюдаемая нами в FeSe [7,8], а также во многих органических сверхпроводниках [9-11]. Мы наблюдаем [7,8] и объясняем [8], что температура сверхпроводящего перехода, измеренная по сопротивлению вдоль оси z в тонких образцах FeSe значительно (с 8 до 11К) повышается при уменьшении их толщины с 300 до 50 нм. Сравнение наших численных расчетов [8,12] порога перколяции в образцах конечных размеров, как для FeSe [8], так и для органических металлов [12], позволяет не только объяснить экспериментальные данные по анизотропии и росту T_c , но и дает информацию о характерных размерах и форме сверхпроводящих островков вдали от поверхности, не доступную другими экспериментальными методами. Наши модель и расчеты применимы ко многим неоднородным сверхпроводникам, включая ВТСП.

Работа выполнена при поддержке проектов РФФИ № 21-52-12027 и 21-52-12043.

Литература

1. А.А. Варламов и А.И. Ларкин, Теория флуктуаций в сверхпроводниках, Москва, "Добросвет", 2007
2. S. Torquato, Random Heterogeneous Materials, Springer New York, 2002.
3. А.А. Синченко, P.D. Grigoriev, A. P. Orlov et al., Phys. Rev. B **95**, 165120 (2017).
4. P.D. Grigoriev, А.А. Синченко, К.К. Kesharpu et al., JETP Lett. **105**, 786 (2017).
5. S.S. Seidov, К.К. Kesharpu, P.I. Karpov, P.D. Grigoriev, Phys. Rev. B **98**, 014515 (2018).
6. К.К. Kesharpu, V.D. Kochev, P.D. Grigoriev, Crystals, **11**, 72 (2021).
7. T. I. Mogilyuk, P. D. Grigoriev, K. K. Kesharpu, I. A. Kolesnikov, A. A. Sinchenko, A. V. Frolov, and A. P. Orlov, Physics of the Solid State **61**, 1549 (2019).
8. P.D. Grigoriev, V.D. Kochev, A.P. Orlov, A.V. Frolov, А.А. Sinchenko, Materials, **16**(5), 1840 (2023).
9. N. Kang, B. Salameh et al., Phys. Rev. B **81**, 100509(R) (2010).
10. A. Narayanan, A. Kiswandhi, D. Graf et al., Phys. Rev. Lett. **112**, 146402 (2014).
11. Y.A. Gerasimenko, S.V. Sanduleanu et al., Phys. Rev. B **89**, 054518 (2014).
12. V.D. Kochev, К.К. Kesharpu, P.D. Grigoriev, Phys. Rev. B **103**, 014519 (2021).

КОМПЬЮТЕРНАЯ ТОМОГРАФИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ: ПРОГРАММА ДЛЯ ТОМОГРАФИЧЕСКОЙ РЕКОНСТРУКЦИИ STE

Чукалина М.В.^{1,2}, Ингачева А.С.^{1,2}, Гильманов М.И.^{1,2}, Ямаев А.В.^{2,3}, Бузмаков А.В.^{4,2}, Казимиров Д.Д.^{2,3}, Шутов М.С.^{2,6}, Солдатова Ж.В.², Смолин А.А.^{2,6}, Полевой Д.В.^{2,5}, Николаев Д.П.^{1,2}, Арлазаров В.В.^{1,5}

¹ ИППИ РАН, Москва, Россия,

E-mail chukalinamarina@gmail.com

² ООО «Смарт Энджинс Сервис», Москва, Россия

³ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

⁴ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

⁵ ФИЦ ИУ РАН (ИСА РАН), Москва, Россия

⁶ МФТИ, Долгопрудный, Россия

Метод рентгеновской компьютерной томографии позволяет визуализировать внутреннюю морфологическую структуру объекта без разрушения самого объекта. Из собранных под разными углами рентгеновских проекций (рентгенограмм) восстанавливается 3D цифровое изображение объекта. Анализ полученного изображения позволяет проводить виртуальные метрологические измерения, в частности, применяя методы семантической сегментации вычислять локальные объемы областей интересов или строить модели объектов для последующего наблюдения за динамикой изменения их морфологической структуры под воздействием изменяющихся внешних условий. Например, наблюдать за образованием и распространением трещин под давлением в объеме и т.д. Томограф – это аппаратно-программный комплекс. Размер и оптическая плотность томографируемого объекта определяют требования к его аппаратной части. Бессмысленно пытаться изучать структуру металлических дендритов из аккумуляторных батарей, используя томографы, применяемые для оценки качества сварных швов. Несмотря на различия в размерах детекторов, принципах организации сбора проекций и разницу энергий зондов – программная часть томографа выполняет 3 функции: контролирует сбор и передачу рентгенограмм на реконструкцию, реконструкцию 3D цифрового изображения из зарегистрированного набора рентгенограмм и анализирует реконструированное изображение. Анализ может заканчиваться визуальным контролем качества, а может содержать библиотеку автоматически выполняемых метрологических операций, функции автоматического разворачивания виртуальной поверхности и т.д.

В докладе систематизированы и сформулированы задачи, которые приходится решать реконструктору томографа. На реальных примерах продемонстрировано как программные решения, заложенные в реконструкторе STE (Smart Tomo Engine), справляются с плохой калибровкой узлов томографа, показаны примеры использования нейросетевых моделей для увеличения точности реконструкции, сформулированы требования к обучающей выборке для случая применения нейросетевой модели на этапе семантической сегментации результата томографической реконструкции.

Технология “томография под контролем реконструкции” будет представлена примером ее применения на нанотомографе при решении задачи восстановления морфологической структуры электрокатализатора, одного из основных компонентов топливных элементов [1].

Литература

1. Bulatov K., Chukalina M., Kutukova K., Kohan V., Ingacheva A., Buzmakov A., Arlaazarov V.V., Zschech E.// *Nanomaterials*. – 2021. – V. 11 – № 2525. С. – 1-12.

МАГНИТНАЯ ЖИДКОСТЬ НА ОСНОВЕ СИЛИКОНОВОГО МАСЛА И КАЛИБРОВАННЫХ FeNi НАНОПРОВОЛОК

Филиппова Ю.А.^{1,2.}, Папугаева А.В.^{1.}, Разумовская И.В.^{1.}

¹ФГБОУ ВО «Московский Педагогический Государственный Университет»,
Москва, Россия

²ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М. В.
Ломоносова», Москва, Россия

В работе был проведен синтез и исследование реологических свойств в магнитном поле магнитной жидкости (МЖ) на основе носителя – полидиметилсилоксана - и ферромагнитных нанопроволок, синтезированных методом шаблонного синтеза на трековых мембранах, в качестве наполнителя.

МЖ на полимерной основе могут применяться в дистанционно управляемых клапанах и мягкой робототехнике [1], в медицине в качестве противоопухолевой терапии [2], и т.д. Нанопроволоки (НП) являются перспективным наполнителем с точки зрения возможностей изменения в широких пределах геометрии наполнителя.

В качестве исходных шаблонов для матричного синтеза использовали трековые мембраны (ТМ), полученные в ЛЯР ОИЯИ (г. Дубна) на основе пленок ПЭТФ. Начальная толщина плёнок равна 12 мкм. Значения плотности пересекающихся пор составляют $1,3 \cdot 10^9 \text{ см}^{-2}$, диаметр пор равен 100 нм.

Для проведения электрохимического осаждения FeNi в поры ТМ на одну из сторон матрицы напыляли и укрепляли тонкий контактный слой меди, гальванически заполняли поры ТМ ферромагнитным металлом, затем селективно удаляли медный слой и растворяли полимерную матрицу. В результате была получена взвесь из FeNi НП длиной 5,5-6 мкм.

С помощью метода EDS (энергодисперсионная рентгеновская спектроскопия) выявлено относительное содержание в НП Fe и Ni – Fe : Ni = 45 : 55.

Полученные FeNi НП внедряли с помощью гомогенизатора в жидкость-носитель (силиконовое масло REXANT «ПМС 1000»).

Исследования вязкоупругих свойств полученной МЖ (масс.конц. FeNi НП = 0,5%) на ротационном реометре Anton Paar Physica MCR 301 указывают на наличие магнитореологического эффекта.

Благодарности. Работа выполнена по теме Государственного задания Московского Педагогического Государственного Университета (МПГУ) «Физика наноструктурированных материалов: фундаментальные исследования и приложения в материаловедении, нанотехнологиях и фотонике» при поддержке Министерства Просвещения Российской Федерации (АААА-А20-120061890084-9). Филиппова Ю.А. является членом ведущей научной школы Российской Федерации «Оптико-спектральная наноскопия квантовых объектов и диагностика перспективных материалов» (проект НШ-776.2022.1.2).

[1] Chung H. J., Parsons A. M., Zheng L. Magnetically controlled soft robotics utilizing elastomers and gels in actuation: A review //Advanced Intelligent Systems. – 2021. – Т. 3. – №. 3 – С. 2000186.

[2] Такетоми С., Тикадзуми С. Магнитные жидкости. – 1993.-С.116-118.

СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И СВЕРХПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛА $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$

Дегтяренко¹ А.Ю., Гаврилкин С.Ю.¹, Морозов И.В.², Цветков А.Ю.¹, Шилов А.И.¹, Рахманов Е.О.^{2,1}, Кузьмичев С.А.^{2,1}, Кузьмичева Т.Е.^{1,2}

¹Центр высокотемпературной сверхпроводимости и квантовых материалов им. В.Л. Гинзбурга, ФИАН, *degtyarenkoayu@lebedev.ru*

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

В данной работе были исследованы монокристаллы $\text{NaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}$, полученные методом кристаллизации из расплава собственных компонентов CoAs , слабо передопированного состава ($x = 0.045$). Подобранный состав приводит к высокой однородности сверхпроводящих свойств [1]. Методом рентгеноструктурного анализа подтверждена высокая монокристалличность образца $\text{NaFe}_{0.095}\text{Co}_{0.045}\text{As}$. Рассчитанные параметры решетки составляют $a, b = 0,39$ нм, $c = 0,7$ нм. С помощью вибрационной магнетометрии была получена температурная зависимость магнитной восприимчивости монокристалла $\text{NaFe}_{0.095}\text{Co}_{0.045}\text{As}$ с критической температурой сверхпроводящего перехода $T_c \sim 21$ К. Подробно изучена микроструктура монокристалла методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения. Вдоль плоскости ab выявлены планарные дефекты, которые могут выступать в качестве дополнительных центров пиннинга [2]. На петлях гистерезиса $M(H)$, полученных в широком диапазоне температур от 2 до 16 К в полях от 0 до 9 Тл при $H \parallel c$, наблюдается второй пик намагниченности. Плотность критического тока, рассчитанная по модели критического состояния Бина [3], составляет $J_c \sim 10^5$ А/см². Так как полученные петли гистерезиса $M(H)$ симметричны, в образцах преобладает объемный пиннинг. Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 22-72-10082.

Литература

1. Кузьмичев С.А., Морозов И.В., Рахманов Е.О., Шилов А.И., Кузьмичева Т.Е. // Письма в ЖЭТФ. – 2023. – № 2. С. – 614-619.
2. Degtyarenko A. Y., Karateev I.A., Ovcharov A.V., Vlasenko V.A., Pervakov K.S. //Nanomaterials. – 2022. – Т. 12. – №. 21. – С. 3801.
3. Bean C. P. Magnetization of high-field superconductors //Reviews of modern physics. – 1964. – Т. 36. – №. 1. – С. 31.

НАПРАВЛЕНИЯ РАЗВИТИЯ НАНОИОНИКИ В ИПТМ РАН

Деспотули А.Л., Андреева А.В.

Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН (ИПТМ РАН), 142432, Черноголовка, МО, Россия, E-mail: despot@iptm.ru

30 лет назад, в 1993 г. опубликована работа сотрудников ИПТМ РАН [1], в которой введены термин и концепция новой ветви науки и технологии - «наноионика». Новая дисциплина раскрывает основы быстрого ионного транспорта (БИТ) в неоднородном на наномасштабе потенциальном рельефе, а также ищет возможности применения материалов и наноприборов с БИТ. Результаты и перспективы R&D в этой области анализируются в терминах «динамической теории информации» Д.С.Чернавского (наноионика - информационная система, развивающаяся в среде смежных научных дисциплин) и с учетом влияния института стратегического инновационного менеджмента. Показана фундаментальная роль генерации информации в развитии наноионики. Генерация информации понимается по Винеру – Кастлеру – Чернавскому [2], т.е. получен новый результат в истории науки - определение информации, связанное с механизмом ее генерации, впервые дано Н. Винер (1948 г.).

В докладе представлены основные направления развития наноионики в ИПТМ РАН [3] и, в краткой форме, панорамный взгляд на развитие наноионики за рубежом [4]. Результаты, полученные в ИПТМ РАН: (1) обнаружены новые нано-физико-химические системы и критерий образования множества таких систем в высоком вакууме; (2) классификация твердотельных ионных проводников и выделение класса передовых суперионных проводников (ПСИП) – материалов со специфической кристаллической структурой, которая определяет рекордно высокие ион-транспортные характеристики; (3) введение нового направления – наноионика ПСИП; (4) кристаллоинженерия гетерограниц в ПСИП и разработка на этой основе пленочных суперконденсаторов с когерентными гетеропереходами и рекордно высокими частотно-емкостными характеристиками («наноионные суперконденсаторы» - НСК); (5) анализ возможностей применения НСК в глубоко-субвольтовой наноэлектронике; (6) определение путей гетероинтеграции ПСИП и углеродных наноструктур с высокой квантовой емкостью; (7) формулировка и разработка теории динамического отклика слоевых структур с прыжковым ионным транспортом в неоднородном на наномасштабе потенциальным рельефом («структурно-динамический подход наноионики»); (8) введение в физику нового понятия – «ток смещения Максвелла на потенциальном барьере»; (9) объяснение на основе (8), отклика Джоншера, UDR - фундаментальная проблема физики конденсированного состояния; (10) материаловедение и нелинейная динамика ПСИП и наноструктур на их основе. В докладе отмечены перспективы новых направлений - эмиссионная наноионика и биологическая наноионика.

Литература

1. Despotuli A.L., Nikolaichik V.I. // Solid State Ionics. – 1993. – Vol. 60. – P. – 275-278.
2. Деспотули А.Л., Андреева А.В. // Нано и микросистемная техника. – 2021. – Т.23. – № 1. – С. 6-23.
3. Деспотули А.Л., Андреева А.В. // Нано и микросистемная техника. – 2020. – Т.22. – № 8. – С. 403-414.
4. Деспотули А.Л., Андреева А.В. // Нано и микросистемная техника. - 2020. - Т.22. – № 9. – С. 463-484.

ФРАКТАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МАГНИТНОЙ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ GDFECO50/COТВ/GDFECO25

Евстигнеев Р.С.¹⁾, Колпак О.В.²⁾, Горнаков В.С.¹⁾, Шашков И.В.¹⁾

¹⁾ *Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН*

²⁾ *Институт проблем химической физики РАН*

Email: evstigneev@issp.ac.ru

В работе сообщается об обнаружении корреляции между геометрическими характеристиками тонкопленочных ферромагнитных структур и фрактальной размерностью дендритных доменов.

Известно, что в настоящее время взгляды на происхождения дендритных доменов остаются спорными. В частности, ряд исследователей полагает, что дендритный вид магнитных доменов обусловлен макроскопическими параметрами: температура, энергия доменной стенки и т.д. С другой стороны, существует теория, связывающая механизм образования дендритных доменов с геометрией пиннига. [1]

Объектом исследований послужили многослойные ферромагнитные структуры Ta₃/GdFeCo50/CoTb(t)/GdFeCo25/Ta₃ с перпендикулярной магнитной анизотропией, нанесенные магнетронным напылением на стеклянную подложку при комнатной температуре. Образцы отличались толщиной прослойки CoTb t, принимавшей значения 2, 4 и 8 нм. Выбор образца обусловлен как наличием обменной связи на интерфейсе между магнитомягким и магнито жестким слоями, так и частичной неупорядоченностью структуры. Как результат, формирующаяся доменная структура имеет сложный нерегулярный характер.

Эволюция доменной структуры была изучена с помощью магнитооптического эффекта Керра (рис. 1). Основные характеристики доменной структуры оставались неизменными при изменении направления приложенного магнитного поля на противоположное.

Измерены характерные поперечные размеры элементарного дендрита d. Фрактальная размерность D определялась классическим методом «заполнения ящиков».

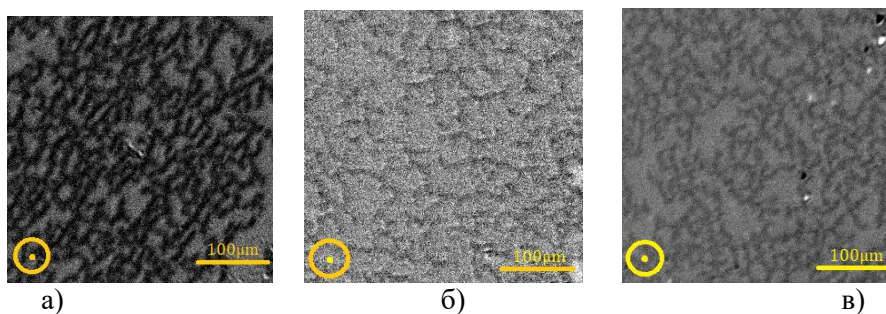


Рис 1. Доменная структура GdFeCo50/CoTb(t)/GdFeCo25:

а) $t = 2$ нм, $d = 18$ мкм, $D = 1.74$; б) $t = 4$ нм, $d = 13$ мкм, $D = 1.78$; в) $t = 8$ нм, $d = 15$ мкм, $D = 1.83$

Отметим, что корреляции между шириной дендритов и фрактальной размерностью не наблюдается. Однако можно утверждать, что между толщиной прослойки CoTb и фрактальной размерностью доменной картины наблюдается прямая корреляция, что указывает на то, что характеристики дендритной структуры обусловлены межслоевым взаимодействием магнито статического происхождения.

Литература

1. Hao-Liang Liu, Wei He, Hai-Feng Du, Qiong Wu, Ya-Peng Fang, Yun Zhu, Jian-Wang Cai, Zhao-Hua Cheng // Journal of Magnetism and Magnetic Materials – 2011 – Volume 323, P. 2238-2242

МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ СТРУКТУР В МАТЕРИАЛАХ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ПЛАЗМЕННЫХ ПОТОКОВ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ВЗРЫВА ПРОВОДНИКА

С. А. Невский¹, Л. П. Башенко^{*1}, В. Д. Сарычев¹,
А.Ю. Грановский¹, В. Е. Громов¹

¹Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк

^{*}*Email Luda.Baschenko@gmail.com*

Для защиты поверхности изделий от износа применяют композиционные покрытия высокой твердости и износостойкости, формируемые с помощью гетерогенных плазменных потоков, полученных путем электрического взрыва проводников. При обработке образцов титана электрическим взрывом с порошком иттрия формируется три слоя, которые различаются морфологией и размерами структурных элементов; поверхностный слой (с наиболее грубой структурой); слой термического влияния; наиболее дисперсный слой, который находится между слоем термического преобразования и подложкой. Рельеф поверхности раздела модифицированный слой – подложка формируется при натекании иттрия на титановую подложку. В работе исследованы механизмы формирования микро- и наноструктур в титановых сплавах при воздействии гетерогенных плазменных потоков на основе представлений о возникновении и развитии комбинированной неустойчивости Рэля-Тейлора и Кельвина-Гельмгольца.

Изучение комбинированной неустойчивости проведено методом конечных элементов. Рассмотрена устойчивость плоского стационарного течения двухслойной несжимаемой жидкости в поле массовых сил. Эволюция поверхности раздела изучалась с помощью метода фазового поля. Динамика двухфазного течения описывается уравнениями Кана-Хилларда. Метод заключается в расчете скалярной функции на всей расчетной области: Важным параметром в модели формирования наноструктур является сдвиговая скорость, для оценки которой на контактной границе вычислено динамическое давление, создаваемое плазменной струей на поверхность подложки. На границе внутреннего слоя для системы Ti-Y сдвиговая скорость достигает 53 м/с. В различные моменты времени наблюдаются процессы интенсивного перемешивания иттрия и титана, причем вихри проникают на глубину примерно 80 мкм, что объясняет наличие иттрия на расстояниях от поверхности обработки, превышающих глубину проникновения по механизму диффузии. Рассмотрение формы границы раздела позволяет сделать вывод о том, что учет поперечной скорости может адекватно объяснить формирование волнообразного рельефа границы раздела покрытия и подложки системы Ti-Y. Основным механизмом формирования наноразмерных структур и волнообразного рельефа границы раздела покрытие – подложка является комбинированная неустойчивость Рэля-Тейлора и Кельвина-Гельмгольца. Смена типа неустойчивостей в случае системы Ti-Y происходит при 10 м/с. Образовавшиеся вихри проникают на расстояние 30 – 50 мкм от поверхности обработки, что на несколько порядков превышает глубину проникновения иттрия и других легирующих элементов по механизму диффузии. Это объясняет наличие атомов иттрия на данных расстояниях.

Благодарность: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект No 22-79-10229).

ТЕПЛОЁМКОСТЬ ГИДРИДА И ДЕЙТЕРИДА ГРАФИТА

Усманов Р. И.^{1,2}, Колесников А. И.³, Кузовников М. А.⁴, Кулаков В. И.²¹Национальный исследовательский университет«Высшая школа экономики», Москва, riusmanov@edu.hse.ru²Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка, kulakov@issp.ac.ru³Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, USA, kolesnikovai@ornl.gov⁴Centre for Science at Extreme Conditions and School of Physics and Astronomy, University of Edinburgh, Edinburgh, United Kingdom, m.kuzovnikov@ed.ac.uk

При атмосферном давлении и температурах 120–520 К на сканирующем калориметре Perkin-Elmer DSC 7 измерена теплоемкость образцов гидрида СН и дейтерида CD графита массой ~15 мг, полученных при $P = 7.5$ ГПа и $T = 670$ К. Гидрид графита – новый углеводород, впервые синтезированный в ИФТТ РАН [1] и представляющий собой теоретически предсказанную ранее [2] фазу «графан II» 3D-графана, состоящую из гофрированных слоев 2D-графана в «chair» модификации. Как видно из Рис. 1 и 2 в пределах указанной погрешности измерений 5%, теплоемкости C_P гидрида и дейтерида графита (отрезки жирных линий) согласуются с температурными зависимостями теплоемкости C_V (пунктирные линии), полученными из рассчитанных в данной работе в приближении LDA спектров фоновой плотности состояний для фаз «графан II». Зависимость $C_V(T)$ для гидрида графита, показанная тонкой сплошной линией на Рис.1, рассчитана по результатам его исследования методом неупругого рассеяния нейтронов (НРН) и заметно отклоняется от экспериментальной зависимости $C_P(T)$ при $T < 200$ К по пока невыясненным причинам.

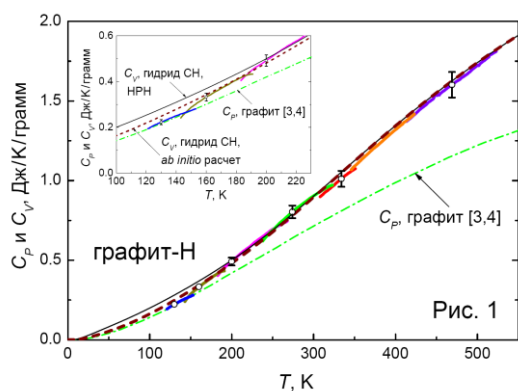


Рис. 1

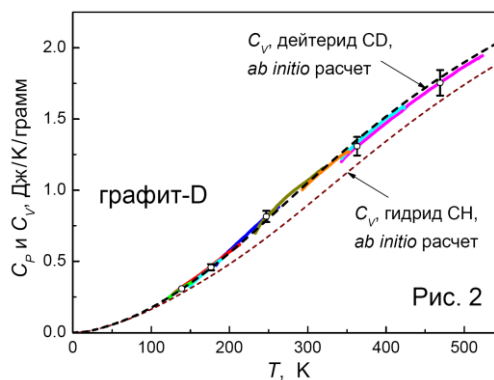


Рис. 2

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках проекта № 23-22-00361. Работа также частично финансировалась в рамках проекта научно-учебных групп НИУ ВШЭ (№23-00-01) и программы Horizon 2020 Европейского Союза (грант № 948895, MetEIOne). Нейтронные исследования проводились на нейтронном спектрометре SEQUOIA, установленном на импульсном источнике нейтронов Пользовательского центра Отдела научных исследований Министерства энергетики США в Окриджской национальной лаборатории.

Литература

1. Antonov V.E., Bashkin I.O., Bazhenov A.V. et al. // Carbon. – 2016. – V. 100. – P. 465–473.
2. Wen X.-D., Hand L., Labet V. et al. // PNAS. – 2011. – V. 108. – P. 6833–6837.
3. DeSorbo W., Tyler W.W. // J. Chem. Phys. – 1953. – V. 21. – P. 1660–1663.
4. Butland A.T.D., Maddison R.J. // J. Nucl. Mater. – 1973/74. – V. 49. – P. 45–56.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДИАМЕТРА ПОР МАТРИЦЫ НА ВОЗМОЖНОСТЬ ПОЛУЧЕНИЯ ГЕТЕРОСТРУКТУРНЫХ НАНОПРОВОЛОК

Долуденко И.М., Загорский Д.Л., Жигалина О.М., Хмеленин Д.Н., Лукарева С.А., Муслимов А.Э.

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия, E-mail: doludenko.i@yandex.ru

Металлические нанопроволоки (НП) различных типов представляют значительный интерес. Среди них особое место занимают т.н. слоевые НП, которые состоят из чередующихся слоёв различного состава. Такие структуры представляют большой интерес в качестве микромагнитов, как элементы спинтроники (вентили, датчики на основе эффекта ГМС и т.п.). Одним из способов получения НП этого типа является матричный синтез, который основан на электрохимическом заполнении металлами сквозных пор в специально подготовленной матрице. Для ряда спинтронных применений слои НП должны быть порядка 5 – 10 нм (меньше длины релаксации спина). Целью работы являлось определения минимальной толщины слоев (Cu и Ni) в гетероструктурных НП, полученных в порах разного диаметра.

Были использованы три типа трековых мембран и получено три типа образцов с диаметрами пор 100, 65 и 30 нм. Осаждение проходило из одного электролита содержащего ионы Ni^{+2} и Cu^{+} . Изменение состава осаждаемого материала достигалось последовательно изменяющимся потенциалом осаждения. Процесс проходил с использованием электрода сравнения, а потенциал изменялся в зависимости от протекшего в ячейке заряда. Режим получения предполагал последовательное снижение толщины слоев от 50 до 3 нм (в пределах одной НП) исходя из расчетных параметров.

После получения образцы исследовались методом ПЭМ. Было доказано, что слои с толщиной в несколько нм сливаются и разделить их невозможно. Имеются отклонения толщин слоёв от расчетных значений в меньшую сторону, вызванные отличиями выхода по току при осаждении в ограниченном объеме, данный эффект увеличивается с понижением диаметра пор. В ряде случаев обнаружены отклонения формы слоев (затекания одного слоя в другой, деформации) данный эффект увеличивается по мере заполнения пор, предполагается, что это связано с неоднородностью начала роста, а также с неровностями подложки. Данный эффект снижается с уменьшением диаметра. Минимальная толщина слоев, которую удалось получить, составляет 7 – 9 нм. При этом влияние диаметра пор незначительно. Оценивался элементный состав слоёв: практически чистый Cu и Ni с 20% Cu.

Полученные данные позволили разработать режимы электроосаждения слоевых НП из никеля и меди с минимальной толщиной слоя порядка 7 – 9 нм. Предложенные режимы позволят получать структуры с заданными геометрическими параметрами слоев для применения их спинтронных устройствах.

Благодарности. Работа проведена при поддержке Гранта РФФ 22-22-00983

ФОРМИРОВАНИЕ ОБОЛОЧЕК ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНЫХ ЭМУЛЬСИОННЫХ КАПСУЛ С МИНЕРАЛИЗАЦИЕЙ КАРБОНАТОМ КАЛЬЦИЯ

Бусленко А.В.¹, Чистяков А.П.^{1,2}, Ванцян М.А.¹, Букреева Т.В.^{1,3}

¹Национальный исследовательский центр

«Курчатовский институт», Москва, Россия

²Московский физико-технический институт, Москва, Россия

³Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

E-mail: anyabuslenko@gmail.com

Полиэлектролитные эмульсионные капсулы - перспективная система доставки лекарств, которая может использоваться для доставки гидрофобных препаратов в том числе различных масел, витаминов и др. [1]. Простым и эффективным способом формирования оболочек эмульсионных капсул является метод послойной адсорбции разноименно заряженных полиэлектролитов (“Layer-by-Layer”, LbL). Данный способ может быть широко использован для создания функциональных оболочек капсул с применением различных механизмов сборки [2]. С целью увеличения механической устойчивости полиэлектролитных эмульсионных капсул было предложено включение неорганических слоев в состав оболочки, что способствует повышению ее механической прочности [3].

В качестве ядра капсул использовали масло ши. Многослойную оболочку формировали из полиэлектролитов - полиаллиламин гидрохлорида (ПАН) и полистиролсульфоната натрия (PSS). Минерализацию структур проводили за счет модифицирования оболочек капсул карбонатом кальция (CaCO_3), синтезированным путем инкубирования капсул в растворах хлорида кальция (CaCl_2) и карбоната натрия (Na_2CO_3).

Капсулы исследовали методами динамического светорассеяния, оптической и электронной микроскопии. Полученные результаты позволяют сделать выводы о влиянии числа полиэлектролитных слоев, концентрации растворов, времени выдерживания микрокапсул на их размер, морфологию и устойчивость. Было показано, что капсулы обладают биосовместимостью.

В работе использовано оборудование Ресурсного центра оптической микроскопии и спектроскопии НИЦ «Курчатовский институт».

Литература

1. Sindhvani S., Chan W.C.W. // J. Intern. Med. – 2021. – V. 290. – № 3. – P. 486–498.
2. Букреева Т.В., Бородина Т.Н., Трушина Д.Б. // Коллоидный журнал. – 2022. – Т. 84. – № 5. – С. 642–656.
3. Patel I.F., Kiryukhin M.V., Yakovlev N.L., Gupta H.S., Sukhorukov G.B. // J. Mater. Chem. B. – 2015. – V. 3. – № 24. – P. 4821–4830.

О ПЛОТНОСТИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ УГЛОВ В СЕЧЕНИЯХ МНОГОГРАННИКА СЛУЧАЙНЫМИ ПЛОСКОСТЯМИ

Константинова Е. П.^{1,2}

¹*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
Москва, Россия,*

²*Научный центр РАН в Черноголовке ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия
lizaconst@icloud.com*

Рассматриваются сечения многогранников случайными плоскостями. Предложен метод генерации случайных сечений и доказаны его статистические свойства. Реализован численный алгоритм оценки плотности распределения углов для выпуклых многогранников. Приведены примеры плотностей распределений в случайных сечениях для куба, правильной треугольной призмы, усеченной призмы (рис. 1). Разработанный алгоритм и полученные плотности распределений могут иметь практическое применение при анализе микроструктур кристаллических сплавов.

Оценки плотностей распределений для многогранников

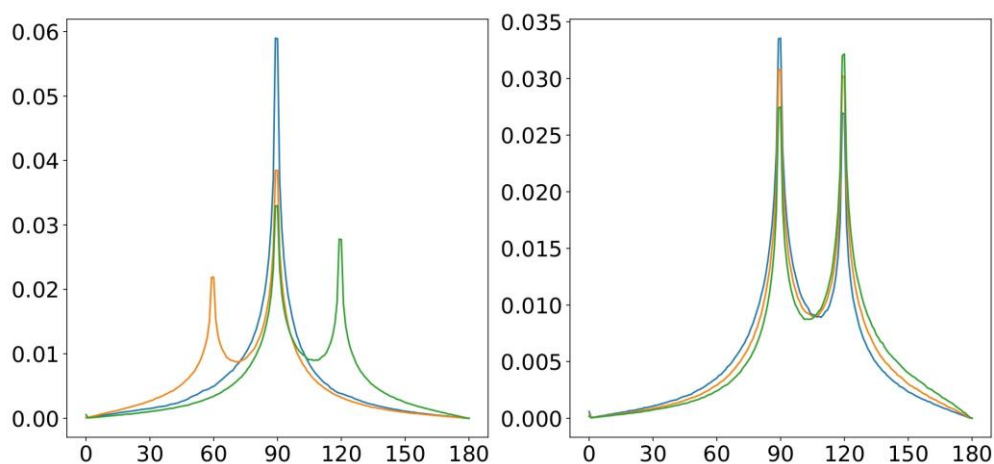


Рис. 1. Плотности распределений углов секущих многоугольников. Голубой - для куба, оранжевый - для правильной треугольной призмы, зелёный - для правильной шестиугольной призмы. Плотности распределений углов секущих усечённой призмы. Голубой - $r=1$, $k=0.6$, оранжевый - $r=1$, $k=1$, зелёный - $r=1$, $k=1.5$.

Работа выполнена в рамках гранта РФФ 22-22-00511.

ОБЕСПЕЧЕНИЕ КАЧЕСТВА ПОВЕРХНОСТИ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ, ПОЛУЧЕННЫХ 3D-ПЕЧАТЬЮ, ИСПУЛЬСНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ

Галецкий И. А.^{1,2}, Улаханов Н. С.^{1,3}, Мишигдоржийн У. Л.¹,
Шин В. И.⁴, Воробьёв М. С.⁴

¹ИФМ СО РАН, Улан-Удэ, Российская Федерация, ivan.galetskiy@bk.ru

²АО «НПО «Техномаш» им. С.А. Афанасьева», Москва, Российская Федерация

³ВСГУТУ, Улан-Удэ, Российская Федерация

⁴ИСЭ СО РАН, Томск, Российская Федерация

В настоящее время в Российской Федерации принято стратегическое направление на создание конкурентоспособной отрасли аддитивных технологий [1].

Технологии аддитивного производства наиболее эффективны для узлов и агрегатов особо ответственного назначения. Необходимость в проведении операций постобработки аддитивно выращенных изделий вызвана потребностью в обеспечении качества поверхности, устранением внутренних дефектов и формированием эксплуатационных свойств.

В качестве метода постобработки предложен подход микролегирования карбидом бора поверхности титанового сплава ВТ 6 с применением импульсной электронно-пучковой обработки. Проведённая работа является логичным и взаимосвязанным продолжением накопления научных основ по технологиям постобработки изделий, полученных методами аддитивных технологий [2, 3].

Материалом исследования являлись прямоугольные образцы 20×12×30 мм, полученные методом электронно-лучевого синтеза на подложке титанового сплава ВТ 6. Электронно-пучковую обработку созданного титанового сплава с предварительно нанесенной пастой из В₄С проводили в источнике электронов «СОЛО» с плазменным катодом (ИСЭ СО РАН) [4].

Исследованы микроструктура и свойства поверхности методами оптической и растровой электронной микроскопии, рентгеновской спектроскопии и оптической профилометрии. Результаты показали, что в тонких слоях покрытия из карбида бора толщиной 15-20 мкм достигнуто снижение шероховатости и повышение микротвёрдости поверхностного слоя, что подтверждает перспективы использования предлагаемого метода финишной обработки поверхности различных материалов и изделий в производстве.

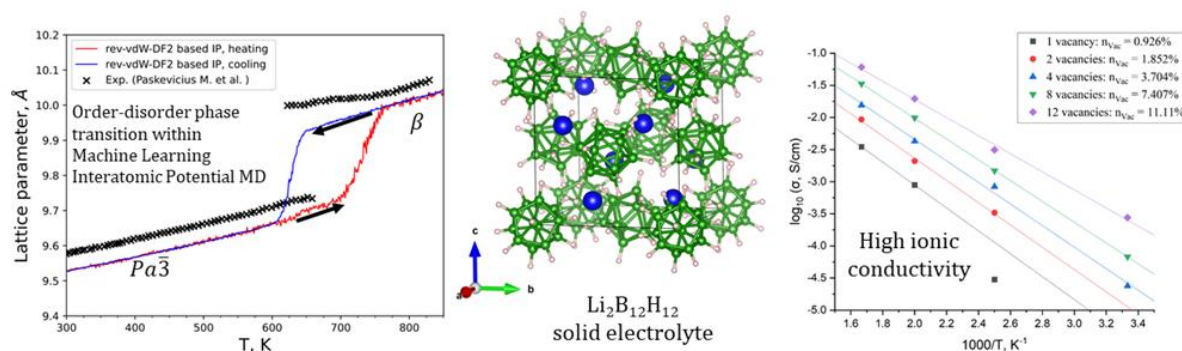
Литература

1. Распоряжение Правительства РФ от 14.07.2021 №1913-р «Об утверждении Стратегии развития аддитивных технологий в Российской Федерации на период до 2030 года» // Собрание законодательства РФ. – 26.07.2021. – № 30. – Ст. 5815.
2. Галецкий И.А., Семёнов А.П., Мишигдоржийн У.Л., Улаханов Н.С., Бурков А.Г. // XXXIII Международная инновационная конференция молодых ученых и студентов по проблемам машиноведения (МИКМУС - 2021). – 2021. С. 24-30.
3. Галецкий И.А., Улаханов Н.С., Мишигдоржийн У.Л., Южаков И.А., Номоев А.В., Бурков А.Г., Семёнов Е.Д. // XIX Конференция по фундаментальным и прикладным проблемам физики. (молодых ученых, аспирантов и студентов). – 2022. С. 8-18.
4. Воробьёв М.С., Москвин П.В., Шин В.И., Коваль Н.Н., Ашурова К.Т., Дорошкевич С.Ю., Девятков В.Н., Торба М.С., Леванисов В.А. // Письма в ЖТФ. – 2021. – Т. 47. – № 10. С. 38-41.

**ACCURATE PHASE TRANSITION AND IONIC CONDUCTIVITY IN $\text{Li}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$
SOLID ELECTROLYTE: MD STUDY WITHIN MACHINE LEARNING
INTERATOMIC POTENTIALS**

Maltsev A. P., Chepkasov I. V., Oganov A. R.

Skolkovo Institute of Science and Technology, Bolshoy Boulevard 30, bld. 1, Moscow 121205, Russia
alexey.maltsev@skoltech.ru



Metal borohydrides are a new promising class of solid-state electrolytes for rechargeable metal ion batteries due to high stability and fast ion conductivity. Accurate prediction of phase transitions, diffusion coefficients and ion conductivity is essential for the design of solid electrolytes derived from known metal borohydrides. Quantum chemical calculations combined with molecular dynamics (MD) methods might be a powerful tool for prediction of thermodynamic and kinetic properties. For accurate and fast quantum chemical calculations proper DFT functionals must be used and for MD precise interatomic potentials are required. MD with the use of machine learning interatomic potentials (MLIP) are effective in terms of accuracy and cost of calculations and allow to simulate large scale objects of thousands of atoms in a large time scale from nanoseconds to even microseconds, combining accuracy of quantum-chemical calculations and efficiency of classical (empirical) molecular dynamics. In this work different DFT functions were tested for the $\text{Li}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$ system. It was shown that the rev-vdW-DF2 functional is the best in terms of phonon spectrum and lattice parameters description. MLIPs based on rev-vdW-DF2 DFT data were constructed for the $\text{Li}_2\text{B}_{12}\text{H}_{12}$ and $\text{LiCB}_{11}\text{H}_{12}$ solid electrolytes. With the use of constructed MLIP heating and diffusion simulations were done for both systems. MLIPs predict phase transitions of both systems to be in excellent agreement with the experiment with deviations from experimental phase transitions temperatures less than 50K and predict lattice parameters of studied systems with errors less than 0.05 Å at over the temperature range from 300 to 9000K. Ion conductivity of vacancy rich systems are also in a good agreement with the experimental data, as well as activation barriers of diffusion. In general, all MLIPs reproduce DFT well and the procedure of constructing MLIPs within active learning is reliable for closo-boranes salts. MLIP based on rev-vdW-DF2 DFT data seems to describe phase transitions, lattice parameters and diffusion patterns with excellent accuracy and such combined use of DFT with van der Waals corrections, active learning and molecular dynamics might be helpful for research of related systems with similar closo-borane anions and/or other cations and might be useful for even unsynthesized materials.

The study was supported by the Russian Science Foundation, grant No. 22-73-00219.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В НИТИНОЛЕ (NiTi) ПРИ ОБЛУЧЕНИИ НАНОКЛАСТЕРАМИ И ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ

З.А. Шарипов¹⁾, Б. Батгэрэл³⁾, И.В. Пузынин¹⁾, Т.П. Пузынина¹⁾, И.Г. Христов²⁾, Р.Д. Христова²⁾, З.К. Тухлиев¹⁾

¹⁾Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

E-mail: zarif@jinr.ru

²⁾Софийский университет "Св. Климент Охридски", София, Болгария

³⁾Монгольский государственный университет науки и технологии, Улан-Батор, Монголия

Работа посвящена исследованию методами математического моделирования процессов взаимодействия нанокластеров и тяжелых ионов с нитинолом [1]. Одним из основных свойств нитинола является, то, что данное соединение обладает свойством памяти формы. Такое поведение связано с тем, что, фактически, этот материал является интерметаллидом, а не классическим сплавом, и свойства исходных материалов (Ni, Ti) практически в нём не выражены. Уникальным его делает свойство, благодаря которому при закалке взаимное расположение атомов упорядочивается, что приводит к запоминанию формы. Одной из важных и интересных задач радиационной физики является исследование радиационной стойкости материалов с эффектом памяти формы. Экспериментальные исследования по облучению нитинола приведены в [2].

В настоящей работе в первом этапе проведено исследование термических процессов в нитиноле при облучении ионами урана с энергий 1-700 МэВ в рамках модели термического пика (МТП) [3]. Во втором этапе проведено исследование структурных изменений в нитиноле методом молекулярной динамики (МД) [4] при облучении нанокластерами и ионами урана с энергией 1-700 МэВ. Численным моделированием получены размеры областей, где происходит структурные изменения. Проведен сравнительный анализ полученных результатов с экспериментальными данными.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и МОКНСМ в рамках научного проекта №20-51-44001.

ЛИТЕРАТУРА

1. Buehler, W. J.; Gilfrich, J. W.; Wiley, R. C. (1963). "Effects of Low-Temperature Phase Changes on the Mechanical Properties of Alloys Near Composition TiNi". *Journal of Applied Physics*. 34 (5): 1475–1477.
2. A. Barbu, A. Dunlop, A. Hardouin et all. Microstructural modifications induced by swift ions in the NiTi intermetallic compound // *Nucl. Instrum. Meth. B* 145 354 (1998).
3. Лифшиц И.М., Каганов М.И., Танатаров Л.В. К теории релаксационных изменений в металлах // *Атомная энергия*. 1959, Т.6, С.391-402.
4. Гулд Х., Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. Часть 1. М.: Мир. 1990.

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЦИНКОВОГО СПЛАВА ZN-AG-CU ПОСЛЕ РЕДУКЦИИ

Нафиков Р.К.¹, Хафизова Э.Д.², Фахретдинова Э.И.³, Поленок М.В.⁴

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия,

nafickov.ruslan2011@yandex.ru

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия, ela.90@mail.ru

³Институт физики молекул и кристаллов – обособленное структурное подразделение Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, Уфа, Россия, uelka89@mail.ru

⁴Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия, renaweiwei.179@mail.ru

Биорезорбируемые металлы на основе цинковых сплавов воспринимаются как революционные биомедицинские материалы, которые могут использоваться как для сосудистых стентов, так и для ортопедии в виде временных имплантатов [1].

Интересным решением применения данных материалов является замена существующих титановых и стальных пластин и других элементов временного назначения. К примеру, спицы Киршнера и К-спицы, используемые для фиксации и стабилизации костных фрагментов при лечении переломов, скелетной фиксации, внутреннем остеосинтезе, остеотомии, коррекции деформаций.

Концепция биорезорбируемой спицы заключается в том, чтобы фиксировать, выравнивать и удерживать кость в течение определенного периода с последующим безвредным разрушением, когда его механическая опора больше не требуется.

В данной работе проведены исследования влияния редукции с диаметра 10 мм до 5 мм при температуре 150°C на прочностные свойства цинкового сплава системы Zn-Ag-Cu. Редукции подвергался материал с крупнозернистой (КЗ) структурой и ультрамелкозернистой (УМЗ) структурой, полученной методом равноканального углового прессования [2].

Механические свойства сплавов определяли на испытательной машины Instron 5982 при комнатной температуре со скоростью деформирования 1 мм/мин. Испытания проводились на полученных стержнях. Исследование микроструктуры цинкового сплава в исходном состоянии проводилось с использованием оптического микроскопа Olympus GX51. УМЗ структуру исследовали методом растровой электронной микроскопии на электронном микроскопе JEOL JSM-6490LV, а также рентгеноструктурным анализом на рентгеновском дифрактометре Bruker D2 Phaser.

Редукция позволила получить из малых образцов стержни длиной до 30 см с высокими механическими свойствами.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания на оказание государственных услуг ФГБОУ ВО «УУНиТ» (соглашение № 075-03-2023-119/1) «Молодежная научно-исследовательская лаборатория НОЦ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях».

Литература

1. Mostaed E, Sikora-Jasinska M, Drelich JW, Vedani M. Zinc-based alloys for degradable vascular stent applications. *Acta Biomater.* 2018;71:1-23. doi:10.1016/j.actbio.2018.03.005
2. Fakhretdinova E.I., Khafizova E.D., Asfandiyarov R.N., Raab G.I., Islamgaliev R.K., Semenov A.S. The study of influence of temperature and speed conditions on the mechanical properties of bioresorbable Zn-4Ag-Cu zinc alloy during equal-channel angular pressing. *Frontier Materials & Technologies*, 2022, no. 3, pp. 68–78. DOI: 10.18323/2782-4039-2022-3-2-68-78.

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЦИНКОВОГО СПЛАВА ZN-3LI-MG ПОСЛЕ КРУЧЕНИЯ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Хафизова Э.Д.¹, Поленок М.В.², Нафиков Р.К.³

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия, ela.90@mail.ru

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия, renaweiwei.179@mail.ru

³ Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия,
nafickov.ruslan2011@yandex.ru

С развитием общества возрастает потребность в ортопедических имплантационных материалах из-за увеличения количества травм костей, костных дефектов и других проблем, связанных со старением населения, болезнями и несчастными случаями. В последнее время биорезорбируемые металлические материалы стали одним из главных направлений исследований в области ортопедических материалов. Биорезорбируемые металлические материалы делятся на три вида: на основе магния, железа и цинка. Важными характеристиками таких металлических материалов являются время резорбции материала в организме человека и безопасность продуктов разложения. Например, материалы на основе магния демонстрируют слишком быструю коррозию, в то время как продукты коррозии сплавов на основе железа могут вызвать серьезные побочные эффекты в организме человека [1-2].

В свою очередь, исследования показывают, что биорезорбируемые материалы на основе цинка обладают рядом уникальных свойств, которые делают его потенциально полезным для использования в различных медицинских изделиях. Он обладает хорошей биосовместимостью и цитосовместимостью, что делает его безопасным для использования в качестве ортопедических имплантатов. Однако, применение чистого цинка для ортопедических целей невозможно из-за низких прочностных свойств. [3].

В данной работе проведены исследования повышения прочностных свойств методом легирования Li и Mg, а также кручением под высоким давлением (КВД) на наковальне Бриджмена при комнатной температуре под давлением 6 ГПа со скоростью 1 оборот в минуту.

Получены образцы с высокими значениями микротвердости до 200 HV. В работе также изучена микроструктура цинкового сплава до и после деформации методом растровой электронной микроскопии на электронном микроскопе JEOL JSM-6490LV, а также рентгено-структурным анализом на рентгеновском дифрактометре Bruker D2 Phaser. Обсуждены фазовые переходы во время динамической рекристаллизации.

Исследования выполнены за счет средств гранта в области науки из бюджета Республики Башкортостан для государственной поддержки молодых ученых (НОЦ-ГМУ-2022, Соглашение № 1 от 13.12.2022).

Литература

1. Di T., Xu Y., Liu D., Sun X. // Microstructure, Mechanical Performance and Anti-Bacterial Activity of Degradable Zn-Cu-Ag Alloy. – Metals. – 2022; – V.12. – P. 1444.
2. Kuhlmann J., Bartsch I., Willbold E., Schuchardt S., Holz O., Hort N., Höche D., Heineman W.R., Witte F. // Fast escape of hydrogen from gas cavities around corroding magnesium implants. – Acta Biomater. – 2013. –V. 9. – P. 8714–8721.
3. Tong X., Zhang D., Zhang X., Su Y., Shi Z., Wang K., Lin J., Li Y., Lin J., Wen C. // Microstructure, mechanical properties, biocompatibility, and in vitro corrosion and degradation behavior of a new Zn–5Ge alloy for biodegradable implant materials. – Acta Biomater. – 2018, – V. 82. – P. 197–204.

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ФОНЕ ПРОИЗВОЛЬНОГО СПИНА

Каушалъ К. Кешарпу, Евгений А. Кочетов, Ольга Г. Садыкова

*Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова
Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, РФ*

В ключевой статье Холдейна доказано, что магнитное поле не является необходимым для возникновения квантового эффекта Холла (КЭХ). В модели Халдейна КЭХ возникает из-за мнимых прыжков электронов на ближайшего соседа. Однако модель Холдейна построена в рамках теории электронной зонной структуры, в которой отсутствует сильная электронная корреляция. Отсюда, естественно, возникает вопрос, возникает ли в случае сильной электронной корреляции --- когда обычная электронная зонная теория не работает --- КЭХ в отсутствие магнитного поля?

В настоящей работе мы рассматриваем систему сильно коррелированных электронов, перемещающихся по двумерной решетке, которая описывается моделью Хаббарда при бесконечно сильном локальном отталкивании $U \approx \infty$. В этом случае квантовые числа электрона распадаются. Следовательно, электрон не является четко определенной квазичастицей, и система не может быть описана электронной зонной структурой.

Сначала мы сформулируем теорию эффективного низкоэнергетического $su(2|1)$ -интегрального действия по траекториям для описания сильно коррелированных электронов. В этом случае электроны можно описать как бесспиновые заряженные фермионные поля χ_i , которые известны как холоны или допаны, и спиновые бозонные поля z_i , известные как спиноны. Поле z_i описывает спиновые степени свободы в супералгебре $su(2|1)$. На самом деле эту супералгебру можно рассматривать как простейшее расширение спиновой $su(2)$ алгебры с фермионами, описываемыми числами Грассмана χ_i . Наш второй шаг — ограничить динамику спина, зафиксировав классический фон спина, чтобы нарушить симметрию относительно обращения времени. Таким образом мы приходим к топологическому зонному изолятору, который возникает из-за квазичастиц χ_i без участия электронной зонной структуры. Наш главный результат таков: сильные корреляции могут управлять КЭХ без внешнего магнитного поля при условии, что холоны приобретают собственную зонную структуру, которая, если она имеет щель, может быть классифицирована по числам Черна. Это так, если спиноны — другая фракционированная степень свободы — допускают их описание через теорию срединного поля. Такой подход может быть полезен для описания сильно коррелированных (из-за большого кулоновского потенциала на атомах) электронов, если можно полностью подавить квантовые спиновые флуктуации.

Список литературы:

- [1] J. Maciejko and G.A. Fiete, Nature Physics 11, 385 (2015).
- [2] K. K. Kesharpu, E. A. Kochetov, and A. Ferraz, arXiv:2212.02812 [cond-mat].
- [3] A. Ferraz and E. Kochetov, Physical Review B **105**, 245128 (2022).

КОНТРОЛЬ ЗА ВОЗНИКНОВЕНИЕМ И РАСПРОСТРАНЕНИЕМ ТРЕЩИНЫ В ТОКОПРОВОДЯЩИХ МАТЕРИАЛАХ

Кийко В.М.¹, Хвостунков К.А.², Абашкин С.А.¹, Федотов К.А.²

¹*Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка Московской обл., Россия,
kiiko@issp.ac.ru*

²*Московский государственный университет, г. Москва, Россия
khvostunkov@gmail.com*

Распределение поля электрических потенциалов в токопроводящих материалах определяется геометрией образца и положением контактов подвода электрического тока через него и не зависит ни от величины электропроводности материала образца, ни от величины тока через образец, ни от его температуры. При возникновении в образце трещины или при изменении ее длины изменяется распределение эквипотенциальных линий по его поверхности. Определение этого взаимно-однозначного соответствия дает возможность автоматически определять положение трещины в образце в процессе контроля.

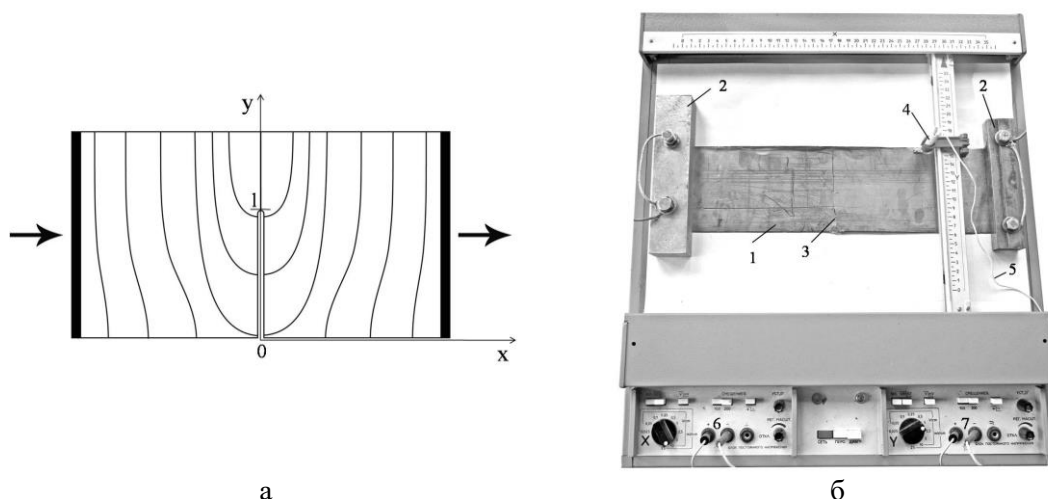


Рис. 1. Схема расположения эквипотенциальных линий по поверхности образца с трещиной l при пропускании через него электрического тока (показано стрелками) (а); б – устройство для проведения модельных экспериментов: 1 – образец, 2 – токоподводы, 3 – трещина – боковой надрез, 4 – датчик управляющих сигналов, 5 – проводник управляющих сигналов, 6 – ввод управляющего сигнала по оси x , 7 – ввод управляющего сигнала по оси y .

Распределение потенциалов в образце устанавливается путем аналитического решения на основе использования конформного отображения в двумерной постановке, результаты расчетов коррелируют с данными экспериментов, проведенных на образцах из различных токопроводящих материалов. На рис. 1а схематично показаны эквипотенциальные линии на поверхности образца с трещиной длиной l , а на рис. 1б – фотоснимок двумерного устройства, позволяющего автоматически отслеживать положение трещины в модельных образцах. Кроме модельных экспериментов было изготовлено лабораторное устройство для автоматической регистрации усталостных трещин в образцах из листовых металлических материалов и проведены соответствующие испытания.

РЕАКТИВНОЕ СМАЧИВАНИЕ МАХ-ФАЗЫ Cr_2AlC РАСПЛАВАМИ НА ОСНОВЕ МЕДИ

Жевненко С.Н.¹, Горшенков М.В.²

¹НИТУ МИСИС, Москва, РФ, zhevnenko@misis.ru

²НИТУ МИСИС, Москва, РФ, mvg@misis.ru

Cr_2AlC принадлежат к семейству тройных слоистых соединений называемых МАХ фазами [1]. МАХ-фазы, иногда называемые «пластичной керамикой», обладают уникальным сочетанием свойств металлических материалов и керамики (хорошая электро- и теплопроводность, обрабатываемость, термостойкость, стойкость к высокотемпературному окислению) [2]. Применение этих материалов в качестве элементов конструкций предполагает развитие жидкофазных методов создания композиционных материалов с использованием МАХ-фаз (в частности, Cr_2AlC), разработки высокотемпературных припоев, пропитывающих расплавов и т.д. Высокотемпературное смачивание и капиллярное пропитывание пористых тел является важной технологией создания многофазных материалов. Эта технология эффективна в случае полного или неполного смачивания расплавом пористого тела, практически, контактный угол смачивания плоской поверхности должен составлять $<60^\circ$. Медь является основой многих припоев, при этом, она плохо смачивает Cr_2AlC . Введение поверхностно-активных компонентов в расплав является способом улучшить условия смачивания «реактивным» путем (с активным перераспределением элементов и образованием новых фаз на контактной поверхности). Элементы, образующие прочные карбиды и растворяющиеся в меди, могут являться такими компонентами. Были использованы хром, титан и гафний в качестве активных металлов. Измеряли кинетику изменения контактного угла, скорость увеличения диаметра пятна контакта при переносе капли расплава на поверхность МАХ-фазы. Измерения проводили с помощью высокоскоростной видео- (около 10000 к/с) и термовизионной (1000 к/с) съемки при температурах в интервале 1100 – 1250 °С [3]. Исследования методом сканирующей электронной микроскопии на поперечном шлифе выявляли фазовые и химические изменения в процессе высокотемпературного взаимодействия. Помимо реактивного смачивания наблюдали процессы декомпозиции МАХ-фазы, выход алюминия из карбида и растворение его в медном расплаве.

Работа выполнена при поддержке грантом РФФ 23-19-00657

Литература

1. Barsoum M. W., The $\text{M}_{\text{N}+1}\text{A}_\text{X}\text{N}$ Phases: A New Class of Solids: Thermodynamically Stable Nanolaminates // Prog. Solid State Chem. – 2000. - V. 28. – P. 201
2. Ghosh N.C., Harimkar S.P., Consolidation and synthesis of МАХ phases by Spark Plasma Sintering (SPS): a review // Advances in Science and Technology of $\text{M}_{\text{n}+1}\text{A}_\text{X}\text{n}$ Phases – 2012. – P. 4
3. Zhevnenko S. N., Gorshenkov M. V., Petrov I. S. Effect of B on improving wetting and imbibition of sintered porous Ta by Cu melt // Journal of Alloys and Compounds. – 2021. – V. 860. – P. 157886.

ВЛИЯНИЕ ХРОМА НА КАПИЛЛЯРНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ РАСПЛАВА МЕДИ С УГЛЕРОДНЫМ ВОЛОКНОМ

Жевненко С.Н.¹, Одинцова Ю.В.², Хайруллин А.Х.³

¹НИТУ МИСИС, Москва, РФ, zhevnenko@isis.ru

²НИТУ МИСИС, Москва, РФ, borisovajulia@list.ru

³НИТУ МИСИС, Москва, РФ, aika-88@inbox.ru

Исследовали влияние добавок хрома на изменение условий смачивания расплавом меди стеклоуглерода. Кинетику изменения контактного угла смачивания и скорость движения расплава по поверхности измеряли прямо, используя установку и методы, описанные в работе [1]. Измерения проводили при различных температурах в интервале 1100 °С – 1400°С в высоком вакууме. Хром значительно снижает контактный угол смачивания и создает условия для пропитки расплавом Cu[Cr] пористых углеродных материалов. Были проведены эксперименты по пропитке при различных температурах. В качестве пористого углерода использовали углеродное волокно в виде ткани и уплотненных сонаправленных волокон. Медные фольги с нанесенным хромом применяли в качестве припоя для создания композиционного материала с упорядоченным расположением углеродных волокон в сплаве. Такие композиционные материалы в дальнейшем планируется использовать в качестве модельных при создании анизотропных подложек для изучения кинетики смачивания, растекания и пропитки различными расплавами гетерофазных поверхностей.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания FSME-2023-0007

Литература

1. Zhevnenko S. N., Gorshenkov M. V., Petrov I. S. Effect of B on improving wetting and imbibition of sintered porous Ta by Cu melt // Journal of Alloys and Compounds. – 2021. – V. 860. – P. 157886.

КИНЕТИКА СПЕКАНИЯ ПОРИСТОГО ЖЕЛЕЗА В ПАРАХ МЕДИ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Петров И.С.¹, Жевненко С.Н.²

НИТУ МИСИС, Москва, РФ, ioannespetrovus@gmail.com

НИТУ МИСИС, Москва, РФ, zhevnenko@misis.ru

В работе исследована кинетика спекания железных пористых образцов в атмосфере паров меди в сравнении с кинетикой спекания в арговодородной смеси и в вакууме порядка 10^{-5} мм.рт.ст. Пористые образцы были получены спеканием порошка чистого сфероидизированного железа ОСЧ-6-2. Начальная пористость подложек составляла 0,45–0,50. В качестве источника паров был использован расплав меди чистотой 99,998% Cu. Эксперименты были проведены в установке, описанной в работе [1]. В экспериментах были получены серии фотографий при высокой температуре *in situ*, на которых определяли геометрические размеры образца. Снимки обрабатывали с помощью программного обеспечения ImageJ. В результате обработки серии снимков были получены временные зависимости объема образцов от времени и из полученных графиков были рассчитаны временные зависимости пористости при различных температурах. Было установлено, что спекание в парах меди приводит к ускорению процесса, а при температурах выше 1400 °С, сопровождается интенсивным испарением железа и приводит к потере массы образцов. Поперечные шлифы были исследованы на сканирующем электронном микроскопе с целью установления структуры и химической неоднородности спеченных тел.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания FSME-2023-0007

Литература

1. Zhevnenko S. N., Gorshenkov M. V., Petrov I. S. Effect of B on improving wetting and imbibition of sintered porous Ta by Cu melt // Journal of Alloys and Compounds. – 2021. – V. 860. – P. 157886.

САМООРГАНИЗАЦИЯ НАНОЧАСТИЦ Ni НА ПОВЕРХНОСТИ $\text{Bi}_2\text{Te}_3(0001)$

**Чекмазов С. В.¹, Рычков А. А.¹, Капустин А. А.¹, Ионов А. М.¹, Яшина Л. В.²,
Божко С. И.¹**

¹*Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка, Россия*

²*Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

E-mail: chekmazov@issp.ac.ru

Методом сканирующей туннельной микроскопии обнаружено упорядочение наночастиц Ni в результате процесса самоорганизации на поверхности (0001) топологического изолятора Bi_2Te_3 . Показано, что при заданном режиме напыления Ni плёнка растёт в виде отдельных частиц с характерным размером 10 – 20 нм и высотой около 0,5 нм. Эти частицы при комнатной температуре самоорганизуются на поверхности топологического изолятора в отдельные цепочки. Расстояние между Ni наночастицами в цепочке составляет 20 – 70 нм. Сразу следует отметить отсутствие подобного упорядочения Ni частиц на поверхности (0001) другого топологического изолятора, Bi_2Se_3 : выращенная в тех же самых условиях плёнка представляет собой равномерно распределённые по всей площади поверхности наночастицы.

Экспериментальные результаты показывают, что сформированные цепочки отклонены от кристаллографического направления $\text{Bi}_2\text{Te}_3[-1\ 2\ -1\ 0]$ на угол $7^\circ - 10^\circ$. В данной работе выделяется соответствие данного направления следования у цепочек с особыми **k**-направлениями на изоэнергетическом контуре ($E = E_F$) топологических поверхностных состояний Bi_2Te_3 .

Природа образования этих цепочек обсуждается с точки зрения возникновения вокруг адсорбированной Ni наночастицы областей с магнитной поляризацией, причём данные области имеют выделенные направления расположения вдоль поверхности. Эти направления определяются анизотропией концентрации спин-поляризованных электронов в разных каналах обратно и упруго рассеянных от наночастицы электронов поверхностных состояний топологического изолятора, и такие каналы могут возникать в присутствии магнитного момента Ni наночастицы. По причине того, что изоэнергетическая кривая, $E(k_x, k_y) = E_F$, топологических поверхностных состояний $\text{Bi}_2\text{Te}_3(0001)$ поверхности представляет собой вогнутый гексагон, то такая анизотропия в обратном рассеянии электронов будет иметь место, а, как следствие, – присутствие направленных областей с ненулевым магнитным моментом. Поэтому другая адсорбированная рядом и слабо связанная с поверхностью Ni наночастица может втягиваться в данную область под воздействием соответствующего магнитного поля, сформировывая тем самым направленную цепочку из наночастиц на $\text{Bi}_2\text{Te}_3(0001)$ поверхности. В то же время аналогичный изоэнергетический контур поверхностных состояний $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$ поверхности представляет собой окружность. Отсутствие каких-либо выделенных направлений на этом контуре приводит лишь к отсутствию аналогичного эффекта анизотропии в каналах обратного рассеяния электронов от наночастицы. Как итог, на $\text{Bi}_2\text{Se}_3(0001)$ поверхности имеется лишь равномерное распределение Ni наночастиц по всей площади.

ТЕОРИЯ ВЗАИМНОЙ ДИФФУЗИИ В БИНАРНЫХ, МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ И ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ СПЛАВАХ. АЛЬТЕРНАТИВНЫЙ ПОДХОД

А. В. Назаров^{1,2}

¹Национальный Исследовательский Ядерный Университет, МИФИ, Москва, Россия

²Национальный Исследовательский Центр "Курчатовский институт", Москва, Россия

В этой работе особенности диффузии в многокомпонентных и высокоэнтропийных сплавах (ВЭС) изучаются с помощью теоретического подхода, который является обобщением кинетической теории взаимной диффузии, разработанной нами ранее [1-7]. Отметим, что в отличие от традиционной теории Даркена, указанный подход учитывает активную роль вакансий, равновесное распределение которых не предполагается, поэтому в уравнениях для потоков компонентов есть вклады, обусловленные градиентом концентрации вакансий. При этом разработан новый вариант линеаризации уравнений исходной системы, позволяющий найти медленно меняющиеся со временем слагаемые в уравнениях для концентраций компонентов без ограничений на возможный интервал изменений концентраций компонентов сплава. Как показано ранее [3-7], именно такие слагаемые дают основной вклад в распределение концентраций в диффузионной зоне. Отметим, что уравнения для потоков компонентов в бинарных и многокомпонентных системах в рамках альтернативной теории взаимной диффузии (АТВД) получены впервые. Эти уравнения учитывают, в частности, стоки (источниками) вакансий и средние расстояния между ними.

В первом разделе работы математический аппарат подхода проиллюстрирован на примере бинарной системы, получены уравнения для перераспределения концентраций в диффузионной зоне и скорости перемещения меток в эффекте Киркендалла. Причем, в отличие от теории Даркена, в уравнениях для скорости перемещения меток основной вклад связан с градиентом концентрации вакансий. Это позволило дать иное объяснение эффекту Киркендалла и разработать модель расчета сдвига меток в бинарных и тройных системах. Во втором, приведены основные этапы получения уравнений для потоков в многокомпонентных системах и выписаны итоговые уравнения. В третьем разделе представлены результаты иллюстративных расчетов для концентрационных зависимостей матрицы коэффициентов взаимной диффузии и численные решения системы нелинейных диффузионных уравнений. Анализ полученных уравнений для потоков компонентов и моделирование на их основе концентрационных профилей в многокомпонентных сплавах показывает, что даже для идеальных твердых растворов в следствие вакансионного механизма диффузии градиент концентрации любых двух компонентов приводит к возмущению концентраций остальных первоначально однородных. Этот эффект может как ускорять, так и замедлять диффузионные потоки. В последней части работы анализируются возможные причины замедленной диффузии в ВЭС.

Литература

- [1] А.В. Назаров, К.П. Гуров, ФММ, –1972. –Т. 34– с. 936.
- [2] А.В. Назаров, ФММ,– 1973. – Т. 35– с. 645.
- [3] А.В. Назаров, К.П. Гуров, ФММ,– 1974. – Т. 37– с. 496.
- [4] А.В. Назаров, К.П. Гуров, ФММ,– 1974. –Т. 38– с. 486.
- [5] А.В. Назаров, К.П. Гуров, ФММ,– 1974. – Т. 38– с. 689.
- [6] А.В. Назаров, К.П. Гуров, ФММ,– 1978. – Т. 45– с. 885.
- [7] А.В. Назаров, Физика и химия обработки материалов– 2018. N2– с. 48.

БЛИЖНИЙ И ДАЛЬНИЙ МАГНИТНЫЙ ПОРЯДОК В $\text{Ba}_2\text{Mn}_3(\text{SeO}_3)_6$ С ЧЕРЕДОВАНИЕМ СЛОЕВ ТИПА ПЧЕЛИНЫЕ СОТЫ ИЗ ИОНОВ Mn^{3+} И ТРЕУГОЛЬНЫХ СЛОЕВ ИОНОВ Mn^{2+}

Моськин А.В.^{1,2}, Козлякова Е.С.^{1,2}, Чон Сын Хван³, Ку Хён Джу³,
Вангбо Мён-Хван^{3,4}, Васильев А.Н.^{1,2}

¹НИТУ МИСИС, НИЛ «Функциональные квантовые материалы», Москва, Россия,

²МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

³ Университет Кёнхи, Сеул, Южная Корея

⁴ Университет Северной Каролины, Реле, США,

Низкоразмерные магнитные материалы привлекают внимание и теоретиков, и экспериментаторов. Теория Гуденафа-Канамори-Андерсона хорошо описывает суперобмен в простых системах, когда обменное взаимодействие между магнитными катионами осуществляется через единичный ион неметалла. Но есть примеры и дальнего суперобмена через фосфатные или селенитные группировки, по силе сравнимые с суперобменом через кислород.

Изученное в данной работе соединение $\text{Ba}_2\text{Mn}_3(\text{SeO}_3)_6$ [1] состоит из октаэдров $[\text{MnO}_6]$, связанных между собой селенитными группами, причем марганец (II) и (III) соотносятся как 1:2. В структуре можно выделить чередующиеся треугольные слои Mn(II) и слои со структурой типа пчелиные соты Mn(III) . Порошок $\text{Ba}_2\text{Mn}_3(\text{SeO}_3)_6$ был получен в ходе гидротермального синтеза в автоклаве при температуре в 220°C в течение 7 дней с $p\text{H} = 1$ и степенью заполнения $\sim 50\%$.

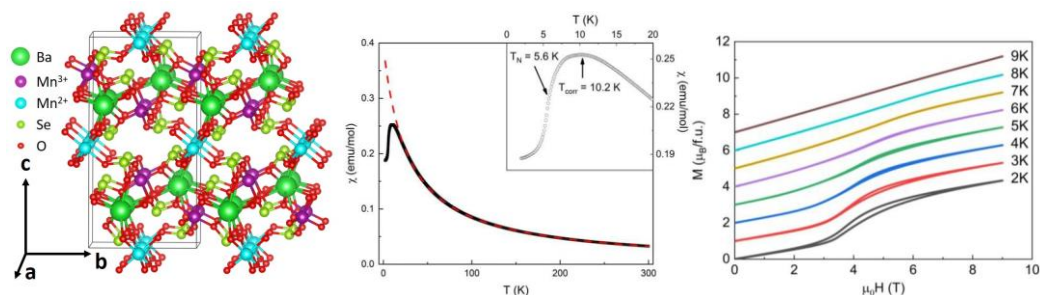


Рисунок 1. (Слева) Структура $\text{Ba}_2\text{Mn}_3(\text{SeO}_3)_6$, (по центру) температурная зависимость восприимчивости, (справа) полевые зависимости намагниченности

Из данных магнитной восприимчивости температура Вейсса θ равна -27.3 K , т.е. магнитная подсистема в целом антиферромагнитна. Эффективный магнитный момент $5.25\mu_B$ совпал с теоретическим. Корреляционный максимум $T_{\text{max}} = 10\text{ K}$ свидетельствует о пониженной размерности магнитной подсистемы. При $T_N = 5.6\text{ K}$ наступает антиферромагнитное упорядочение. На графике $M(H)$ наблюдается метамгнитный переход с гистерезисом при поле в 3.6 Тл . Несмотря на то, что согласно расчетам теории функционала плотности самым большим по значению является ферромагнитный суперобмен между Mn(II) и Mn(III) , магнитная подсистема в целом проявляет свойства низкоразмерного антиферромагнетика. Работа поддержана средствами гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук по соглашению № 075-15-2022-579.

[1] Moskin, A. *et al.* // *Materials* **2023**, *16*, 2685. <https://doi.org/10.3390/ma16072685>

SIGNATURE OF DEPHASING BY SURFACE MAGNETIC DISORDER IN MAGNETORESISTANCE IN EPITAXIAL TIN FILMS

A. I. Lomakin^{1,2✉}, E. M. Baeva^{1,2}, A. I. Kolbatova^{1,2}, G. N. Goltzman^{1,2}

¹*National Research University Higher School of Economics, Moscow, Russia,*

²*Организация, Moscow State Pedagogical University, Moscow, Russia*

✉*Andrey.lomakin.2021@mail.ru*

Titanium nitride (TiN) films exhibit good chemical stability down to nanometer thickness [1] and are used in the fabrication devices for plasmonics [2], quantum-information processing [3] and etc. Typically, fabricated TiN films for superconducting devices are characterized by a relatively small Ioffe-Regel parameter of $k_{\text{F}}l \lesssim 10$, where k_{F} is the Fermi wave vector and l is the carrier mean free path. Superconducting TiN devices demonstrate low dielectric losses at microwave frequencies which are associated with a relatively small surface density of two-level system defects contributed to decoherence of the resonators and qubits [4]. In spite of a possible relation between the two-level systems and the magnetic disorder [5], the impact of the latter in TiN films is much less understood. Although the experiments do not exclude an unknown time-reversal symmetry-breaking mechanism in superconducting TiN, the interpretation is complicated by a high level of nonmagnetic disorder, i.e. low $k_{\text{F}}l$ value.

In order to clarify the role of the magnetic disorder in TiN films, we probe magnetoconductance $\delta\sigma(B)$ in epitaxial TiN films, which exhibit excellent electrical properties ($k_{\text{F}}l \sim 500$). The magnetoconductance is measured at low temperatures from T_{c} to $\sim 3-4 T_{\text{c}}$ and compared with the well-known mechanisms: quantum corrections to conductivity due to superconducting fluctuations (the Aslamazov-Larkin (AL), the Maki-Thompson (MT), and the suppression in the electronic density of states (DOS)), and weak localization. From fitting the experimental data, we extract temperature-dependent electron phase-breaking rate $\tau_{\phi}^{-1}(T)$ from MT and WL terms. We analyzed our data for $\tau_{\phi}^{-1}(T)$ within the framework of scattering mechanisms relevant for thin metal films, namely the scattering on superconducting fluctuations τ_{SC}^{-1} , the electron-electron scattering $\tau_{\text{e-e}}^{-1}$, the spin-flip scattering $\tau_{\text{s}}^{-1}(T)$, the electron-phonon scattering $\tau_{\text{e-ph}}^{-1}$, which all contribute to the net phase breaking rate as follows: $\tau_{\phi}^{-1} = \tau_{\text{e-e}}^{-1} + \tau_{\text{SC}}^{-1} + \tau_{\text{s}}^{-1} + \tau_{\text{e-ph}}^{-1}$. In our study, we observed that contributions $\tau_{\text{e-e}}^{-1}$, τ_{SC}^{-1} and $\tau_{\text{e-ph}}^{-1}$ in τ_{ϕ}^{-1} are not significant. In addition, we see that there are no explicit T-dependencies for $\tau_{\phi}^{-1}(T)$ in TiN samples of different thicknesses. The latter may indicate the presence of some hidden mechanism caused to enhancement of electron dephasing in TiN films. We assume that a potential mechanism may be scattering by magnetic moments that arise in natural oxide on the surface of thin films. The observed values for $\tau_{\phi}^{-1}(T)$ are close to τ_{s}^{-1} , estimated from the Abrikosov – Gorkov model for the studied TiN films [6]. Our findings can be relevant for various thin-film superconducting devices.

Acknowledgments

We are grateful to the team of Prof. V. Shalaev (Purdue University) for TiN samples provided. These measurements were funded by the Russian Science Foundation grant No. 21-72-10117 "The next generation of quantum detectors and sources of single photons based on 2D Van der Waals materials".

References

1. Chawla J. S Zhang X. Y., and Gall D. // J. Appl. Phys. – 2013. – 113, 063704.
2. Catellani A. and Calzolari A. // Phys. Rev. B – 2017. – 95, 115145.
3. Ohya S. et al. // Supercond. Sci. Technol. – 2014. – 27, 015009.
4. Vissers M. R., Gao J., Wisbey D. S., et al. // Appl. Phys. Lett. – 2010. – 97, 232509.
5. de Graaf S. E., Faoro L., Burnett J., Adamyan A. A., et al // Nat. Commun. – 2018. – 9, 1143.
6. Saveskul N., Titova N., Baeva E., et al. // Phys. Rev. Applied – 2019. – 12,054001.

ВЛИЯНИЕ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА РАСТИТЕЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Топоркова А.А.^{1,2}, Винокуров С.А.², Классен Н.В.², Аксенова Т.А.², Покидов А.П.²,
Цебрук И.С.².

¹⁾ *Высшая школа экономики, факультет физики, Москва*

²⁾ *Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка
anna.toporkova@list.ru*

Растения отличаются от других объектов живой природы уникальной способностью приспосабливаться к изменениям внешних условий. Например, они выживают при дозах радиации, в тысячи раз превышающих летальные дозы облучения млекопитающих. Хорошо известна способность деревьев к самозалечиванию повреждений. Высокая приспособляемость отчасти выработана естественным отбором из-за невозможности сменить место обитания на более благоприятное. Имеется большое количество фактов о гибком реагировании растений на изменения температуры, освещенности, ветровых деформаций и других факторов путем регулирования микроморфологии тканей, химического состава биожидкостей, электросопротивления и других характеристик. Изучение механизмов этого регулирования актуально для разработок самовосстанавливающихся материалов, электронных устройств типа мемристоров, развития альтернативной энергетики и т.д. Нами исследовались воздействия электрического поля, освещения, деформаций на микроструктуру, электрофизические параметры, химический состав, люминесценцию, колебательные спектры зеленых и древесных компонентов растений. Обнаружены дипольного характера асимметрия электропроводности, существенно зависящая от величины электрического поля и времени суток, автоколебания электросопротивления в диапазоне от долей герца до десятков герц. Серьезное практическое значение имеют большие пьезоэлектрические характеристики целлюлозных микроволокон, деформации которых под действием электрического поля в сотни раз превышают деформации неорганических пьезоэлектриков. Эти явления объясняются изменениями состояний мембран и стенок микрокапилляров, транспортирующих питательные вещества от корней к зонам фотосинтеза и от них к точкам роста (автоколебания просветов отверстий в мембранах и генерация электромеханических волн в стенках). Такие процессы вызваны пьезоэлектричеством целлюлозы и высокой диэлектрической проницаемостью воды.

При воздействии электрического поля порядка 100 в/см на водные суспензии и зеленой, и древесной масс растений у отрицательного электрода формируются скопления пузырьков, которые в отличие от пузырьков, образующихся в таких же условиях в чистой воде, не лопаются, а сохраняются десятки минут. Скорость накопления таких пузырьков в суспензиях на порядок выше, чем в чистой воде. Кроме того, через несколько минут внутри этих пузырьков формируются твердые микрообразования, всплывающие на поверхность. Анализ электродов показывает, что у отрицательного электрода накапливается водород, а у положительного – ионы гидроксидов. Следовательно, растительные компоненты значительно ускоряют выделение водорода электрическим полем. Первая возможная причина – усиление амплитуд поля внутри растительных капилляров, ускоряющее электролиз воды. Вторая – индуцирование электрическим полем растворения лигнина водой. В пользу этого говорит образование в результате такой электрообработки суспензии древесных опилок оптически прозрачных волокон целлюлозы, очищенных от лигнина. Таким образом, электрическая обработка суспензий древесных отходов не только обеспечивает экономичное производство водорода для водородной энергетики, но и экологичным образом выделяет целлюлозу, которая становится все более востребованной.

Это сберегает от вырубки лесов ради целлюлозы и утилизирует отходы деревообработки.

ОСОБЕННОСТИ ОБЪЕМНОЙ И ГРАНИЧНОЙ СТРУКТУРЫ ПЕРЕДОВЫХ СУПЕРИОННЫХ ПРОВОДНИКОВ

Андреева А.В., Деспотули А.Л.

Институт проблем технологии микроэлектроники и особочистых материалов РАН (ИПТМ РАН), Черноголовка, Московская область, Россия, E-mail: andreeva@iptm.ru

Большинство твердотельных ионных проводников имеют очень низкую ионную проводимость (σ_i) при комнатной температуре (RT), меньше 1 мкСм/см . Однако, существуют семейства ионных проводников на основе H^+ , Li^+ , Cu^+ , Ag^+ , F^- and O^- , которые имеют σ_i от $\sim 0,001$ до 1 См/см при RT или умеренно высоких температурах. Это суперионные проводники (СИП) с быстрым ионным транспортом (БИТ) и низкими энергиями активации движения ионов $E_a < 0.4 \text{ эВ}$.

Структура СИП = каркасная подрешетка + частичный базис + разупорядочение [1].

Структура СИП описывается двумя подрешетками, одна из которых (каркасная), образована неподвижными ионами, имеет определенный базис, а другая, "жидкоподобная" подрешетка не имеет базиса. Подвижные ионы статистически распределены между низкоэнергетическими позициями внутри каркасной подрешетки. В СИП существуют низкоэнергетические пути движения ионов - туннели (каналы) БИТ.

Среди твердотельных СИП авторами выделен класс «передовые суперионные проводники» (ПСИП). Эти материалы обладают уникальными свойствами ($E_a < \sim 0.1 \text{ эВ}$ и рекордно высокая $\sigma_i \sim 0,1 - 1 \text{ См/см}$ при RT), которые связаны с кристаллической структурой ПСИП, близкой к оптимальной для БИТ. Примерами ПСИП – твердых электролитов являются: $\alpha\text{-AgI}$ ($\text{Im}\bar{3}\text{m}$) с $E_a \sim 0.09 \text{ эВ}$, $\sigma_i \sim 1,2 \text{ См/см}$ при 147°C и семейство $\alpha\text{-RbAg}_4\text{I}_5$ ($\text{P4}_1\text{32}$) с рекордно высокой ионной проводимостью при RT { $\alpha\text{-RbAg}_4\text{I}_5$ (Ag^+) $\sigma_i \sim 0.35 \text{ См/см}$ и $\alpha\text{-Rb}_4\text{Cu}_{16}\text{I}_7\text{Cl}_{13}$ (Cu^+) $\sigma_i \sim 0.5 \text{ См/см}$, $E_a \sim 0.1 \text{ эВ}$ }. Основные особенности структуры ПСИП: (1) высокая концентрация, $\sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$, подвижных ионов; (2) жесткая плотная решетка неподвижных ионов, внутри которой подвижные ионы перемещаются через низкоэнергетические тетраэдрические (T) кристаллографические места; (3) перколяционная 3D-сеть взаимосвязанных T - мест, которые образуют туннели БИТ с неглубоким потенциальным рельефом; (4) «оптимальный» туннель БИТ с низким значением E_a , состоит из атомных тетраэдров, сопряженных гранями; (5) определенные соотношения между размерами и поляризацией подвижных и неподвижных ионов в туннелях БИТ с низкими значениями E_a . Анализ возможных положений туннелей БИТ для ПСИП $\alpha\text{-RbAg}_4\text{I}_5$ приводит к новой геометрии: 3-D плотной упаковке стержней, где каждый стержень является туннелем-БИТ. Предложен 3-D дизайн ионных проводников на разных уровнях масштаба (атомном - элементарная ячейка; мезо - доменная структура, микро - поликристаллическая структура). Подчеркнута важная роль когерентности гетеропереходов и границ зерен (ГЗ) в ПСИП. Представлены структурные модели ряда специальных когерентных ГЗ и проанализированы особенности ионного транспорта вдоль и поперек ГЗ. Выделено новое отличительное свойство ПСИП, по сравнению с другими твердотельными ионными проводниками – отсутствие универсального динамического отклика, известного как закон Джоншера [2].

1. Sunandana CS Introduction to solid state ionics: phenomenology and applications. Boca Raton-London- New York: CRC Press Taylor & Francis Group. 2015. 529p.
2. Andreeva A.V., Despotuli A.L. // J. Mat. Sci. – 2020. – Vol. 55. – P. 10375.

ОСОБЕННОСТИ СВЕЧЕНИЯ И ФОРМИРОВАНИЯ СВЕРХСТРУКТУР В ПОЛИМЕРАХ ПРИ МНОГОФОТОННОМ ВОЗБУЖДЕНИИ ИМПУЛЬСНЫМ ЛАЗЕРОМ

Аксенова Т.А., Цебрук И.С., Классен Н.В., Покидов А.П.
Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка
aksenova@issp.ac.ru

При облучении пленок и микроволокон полистирола импульсами инфракрасного лазера с длиной волны 1,064 мкм, длительностью импульса 20 нс и энергией 0,03 Дж обнаружены световые вспышки. В спектрах вспышек проявлялись как голубая люминесценция введенных в полистирол молекул активатора, так и тепловое излучение горячих электронов, разогретых до температуры выше 1000 °С. Соотношение между люминесцентным и тепловым излучением при облучении пленок полистирола постепенно сдвигалось в пользу тепловой компоненты. Но при этом и пленки, и волокна сохраняли свою макроскопическую целостность, хотя при обычном нагреве до 400 °С полимеры разрушаются. Оптической микроскопией по окончании лазерного облучения и в пленках, и в волокнах обнаруживались непрозрачные микровключения размерами до нескольких десятков микрон, по форме близкие к прямоугольникам. Но наибольшее количество таких повреждений наблюдалось не в центре лазерного пятна, где и лазерная интенсивность, и яркость свечения были максимальны, а ближе к его краям. Кроме того, в пленках полистирола возникали системы концентрических колец с расстояниями между кольцами в несколько микрон. Световые излучения микроволокон и пленок направлены анизотропно, распространяясь преимущественно вдоль полимерных цепочек.

Кажущееся парадоксальным сочетание высокотемпературного теплового свечения с сохранением макроскопической целостности полимеров объясняется тем, что многофотонное возбуждение электронных подсистем с разогревом электронов выше 1000°С происходит не непрерывно, а флуктуационно, за времена гораздо короче длительности лазерного импульса. Основная энергия разогретых электронов рассеивается световым излучением за времена значительно короче необходимых для ее передачи полимерным молекулам, поэтому они не успевают перегреться и не разрушаются. Так как сгустки возбуждаемых электронов располагаются вдоль молекул, в этом направлении и развивается их световое излучение по типу сверхлюминесценции. Быстрые нарастания и спады этих сгустков стимулируют генерацию когерентных фононов, движущихся коррелировано с электронными лавинами. Это повышает вероятность новых флуктуаций многофотонного поглощения за счет модуляции энергии возбуждения молекул. Образующиеся таким образом волны неравновесных электронов и фононов могут быть причинами образования как прямоугольных, так и кольцевых сверхструктур в зависимости от морфологии полимерных молекул в данном месте (параллельное расположение создает прямоугольные нарушения, а сферолитное – кольцевые). Увеличение плотностей таких повреждений у краев лазерного пятна – результат миграции газа свободных электронов, так как его диэлектрическая проницаемость на оптических частотах отрицательна и в неоднородном поле выталкивается из области его максимума.

СТРУКТУРА, ВАЛЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТОНКОПЛЕНОЧНОГО ОКСИДА ВОЛЬФРАМА, СИНТЕЗИРОВАННОГО В УСЛОВИЯХ БЛИЗОСТИ ГРАНИЦЫ ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ - ИЗОЛЯТОР

Маликов И.^{1,2}, Чугунов В.³, Ермаков М.³, Мещеряков В.³, Лядов Н.²,
Нуртдинова Л.¹, Салахов М.¹, Тагиров Л.²

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет

²Россия, Казань, КФТИ им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН, ltagirov@mail.ru

³Comberry AR&D, Улланотех, Ульяновск 432072

Электрохромизм – это явление, при котором цвет или прозрачность материала изменяются при приложении напряжения [1]. Оксид вольфрама WO_3 – известный катодный электрохромный материал, оптическая плотность которого изменяется при интеркалировании ионами щелочных и щелочноземельных элементов, входящими в состав электролита электрохромной ячейки [2].

Предварительные исследования показали, что скорость и динамический диапазон переключения электрохромной ячейки возрастают, если оксид вольфрама недоокислен [3,4]. В настоящей работе проведено систематическое исследование влияния парциального давления кислорода при синтезе тонких пленок оксида вольфрама на их морфологию, структуру, элементный состав и валентное состояние вольфрама и кислорода, а также оптические свойства пленок в диапазоне длин волн 0.25-2.5 мкм.

Тонкие пленки оксида вольфрама на подложке из натриевого стекла (предметное стекло для микроскопии) были синтезированы методом реактивного магнетронного распыления в атмосфере реактивного плазмообразующего газа высокой чистоты, состоящего из аргона (плазмообразующий газ, расход $50 \text{ см}^3/\text{мин}$) и кислорода (реактивный газ, расход 4,5,6,8,10 $\text{см}^3/\text{мин}$) при подаваемой на магнетрон мощности 150 Вт и постоянном давлении в камере 30 мТорр. Толщина полученных пленок уменьшалась от 700 до 455 мкм при росте подаваемого потока кислорода при неизменном времени напыления. После эвакуации образцов из вакуумной камеры их разрезали на несколько частей для дальнейших исследований.

Морфология и элементный состав анализировались на микроскопе Carl Zeiss EVO50 XVP и показали изменение стехиометрии оксида в ряду из 5 синтезированных образцов. Валентный анализ выполнялся методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS от SPECS) с разложением спектра ионов вольфрама на валентные составляющие и анализом тонкой структуры спектров кислорода для выявления доли стехиометрического и нестехиометрического кислорода в полученном материале как следствии изменения парциального давления кислорода при синтезе. Установлена корреляция набора валентных состояний вольфрама в пленке и стехиометрии кислорода со скоростью переключения и стабильностью операционных свойств полученного электрохромного материала.

Авторы благодарны И. Вахитову, А. Гумарову, А. Киямову, А. Рогову и Р. Юсупову за помощь в измерениях. Работа И.М., Н.Л. и Л.Т. была поддержана грантом РФФ, проект № 22-22-00980.

Литература

1. Granqvist C.G., Handbook of Inorganic Electrochromic Materials, Amsterdam: Elsevier, 2002 г., 650 с.
2. Zeb S., *et al.* // Materials Advances. – 2021. – V2. – P. 6839-6884.
3. Malikov I.F., *et al.* // Micro (MDPI). – 2022. – submitted.
4. Маликов И.Ф. и др. // ЖТФ. – 2023. – в печати.

ПОВЫШЕНИЕ КОРРОЗИОННОЙ СТОЙКОСТИ КАРБИДА КРЕМНИЯ МЕТОДОМ НАНЕСЕНИЯ ЗАЩИТНЫХ ПОКРЫТИЙ

Слепцова Е.Р.¹, Джумаев П.С.², Исаев Р.Ш.³

¹ НИЯУ «МИФИ», Москва, Россия, ersleptsova@gmail.com

² НИЯУ «МИФИ», Москва, Россия, psdzhumaev@mephi.ru

³ НИЯУ «МИФИ», Москва, Россия, rsisayev@mephi.ru

В настоящее время актуальной проблемой современной ядерной энергетики является создание толерантного ядерного топлива, устойчивого в авариях с потерей теплоносителя [1]. Одним из наиболее перспективных направлений в этой области является создание оболочек твэлов из карбида кремния, обладающего рядом преимуществ. Однако главным его недостатком является склонность к разрушению при нормальных эксплуатационных условиях легководных реакторов [2]. Решением данной проблемы может стать нанесение защитных покрытий на внешний слой оболочек.

В данной работе исследуется повышение коррозионной стойкости карбида кремния при нанесении защитных покрытий с помощью магнетронного напыления. В качестве компонентов покрытия выбраны Al и Cr. Cr в процессе окисления образует защитную оксидную пленку из Cr_2O_3 . Алюминий обладает хорошей растворимостью в хrome. За счет его низкой температуры плавления ($660\text{ }^\circ\text{C}$) и высокой химической активности возможно повышение адгезии между подложкой и покрытием.

Получено хромовое покрытие толщиной 5 мкм. Для образцов произведен скретч тест, показавший, что разрушение покрытия начинается при нагрузке 20 Н. Это означает, что такое покрытие имеет неудовлетворительное сцепление с карбидом кремния. Одним из способов повышения адгезии между покрытием и защищаемым материалом является создание диффузионного слоя между ними. Для этих целей выбран алюминий. Хромоалюминиевое покрытие после напыления состоит из промежуточного слоя Al толщиной 1 мкм и слоя Cr толщиной 5 мкм. Проведен отжиг при температуре $550\text{ }^\circ\text{C}$ в течение 3 ч с целью получения диффузионного слоя на границах раздела SiC-Al и Al-Cr. Однако, образовавшийся слой имеет малую толщину и получаемое покрытие не имеет достаточного сцепления с поверхностью карбида кремния. Проведен также диффузионный отжиг для данного типа покрытий при температуре $750\text{ }^\circ\text{C}$ в течение 30 минут с целью повышения адгезии за счет плавления алюминия и последующей кристаллизации новой фазы, содержащей Cr, Al, Si и C. Полученное покрытие обладает хорошей адгезией с карбидом кремния, которая сохраняется при коррозионных испытаниях. Образцы подвергались окислению на воздухе при температуре $1100\text{ }^\circ\text{C}$ в течение 1000 с. Хромоалюминиевое покрытие сохранило свою целостность, на его поверхности образовалась защитная пленка из оксида хрома Cr_2O_3 .

Литература

1. S.J. Zinkle, K.A. Terrani, J.C. Gehin, L.J. Ott, L.L. Snead, Accident tolerant fuels for LWRs: a perspective, *J. Nucl. Mater.* 448 (2014) 374-379.
2. B. Qiu, J. Wang, Y. Deng, M. Wang, Y. Wu, S.Z. Qiu, A review on thermohydraulic and mechanical-physical properties of SiC, FeCrAl and Ti_3SiC_2 for ATF cladding, *Nuclear Engineering and Technology*. Volume 52, Issue 1, January 2020, Pages 1-13.

МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ И ЭФФЕКТА КИРКЕНДАЛЛА В СПЛАВАХ Fe-Ni и Fe-Cr

Г. В. Сергеев¹, А. В. Назаров^{1,2}

¹НИЯУ "МИФИ", Москва, Россия 1999_1000@mail.ru

²НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия avn46@mail.ru

В первой части работы моделировались диффузионные характеристики атомов в сплавах с ГЦК структурой. При этом применялся модифицированный метод

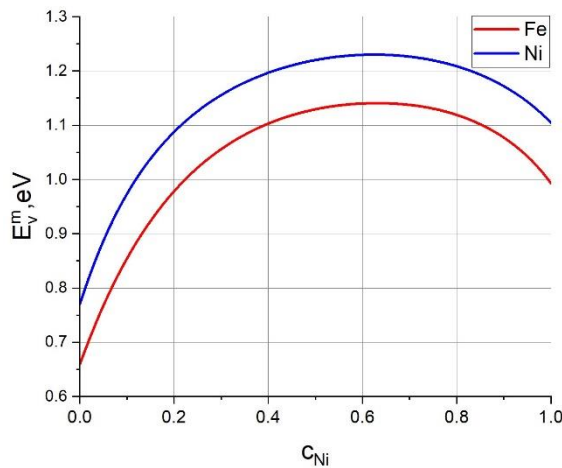


Рис.1 Зависимости энергий миграции атомов.

Молекулярной статики (ММС) [1], характерной особенностью которого является самосогласованное определение структуры атомов в окрестности дефекта в основной расчётной ячейке и характеристик, определяющих смещения атомов, погруженных в упругую среду, окружающую основную ячейку. Были рассчитаны зависимости энергий образования вакансий и миграции атомов (Рис.1) от состава для сплавов Fe-Ni и Fe-Cr. При моделировании использовались многочастичные потенциалы типа ЕАМ [2,3]. Далее находились концентрационные зависимости частот скачков атомов и коэффициентов диффузии.

Коэффициенты взаимной диффузии рассчитывались по формулам [4]:

$$\tilde{D} = \frac{D_A(c_A)D_B(c_A)}{D_A(c_A)c_A + D_B(c_A)c_B} g_{AB}, \quad g_{AB} = 1 + c_A c_B \frac{\partial \ln \frac{A}{B}}{\partial c_A}$$

где D_A и D_B – коэффициенты самодиффузии компонента А и В, $A = \gamma a^2 \Gamma_A$, Γ_A – средняя частота обменов атомов сорта А с вакансией.

Во второй части работы проводилось моделирование перераспределения атомов в диффузионной зоне и смещения меток в эффекте Киркендалла на основе результатов альтернативной теории взаимной диффузии [4]. В этом подходе учитывается активная роль неравновесных вакансий в процессах взаимной диффузии, показано, что отклонение концентраций вакансий от равновесной приводит к выравниваю потоков компонентов, а также получены уравнения для скорости перемещения меток в эффекте Киркендалла. При моделировании численными методами решались нелинейные диффузионные уравнения с использованием диффузионных характеристик, которые были получены на предыдущем этапе, и с учётом среднего расстояния между стоками (источниками) вакансий.

В отличие от теории Даркена, в уравнениях для скорости перемещения меток основной вклад связан с градиентом концентрации вакансий. Поэтому расчеты перемещений производятся параллельно и согласовано с изменением состава и концентрации вакансий в той точке диффузионной зоны, где в текущий момент находится метка. На основе результатов моделирования проведен анализ экспериментальных данных по сдвигу меток в эффекте Киркендалла для упомянутых сплавов.

Литература

1. I.V.Valikova, A.V. Nazarov 2008 Phys. Metals and Metallography 105(6):1-9
2. X. W. Zhou, R. A. Johnson 2004 Phys. Rev B 69, 144113
3. G. Bonny 2013 Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 21 085004
4. A.V. Nazarov, D. A. Belobraga, A.P. Melnikov. ArXiv_1905_03402, 2019

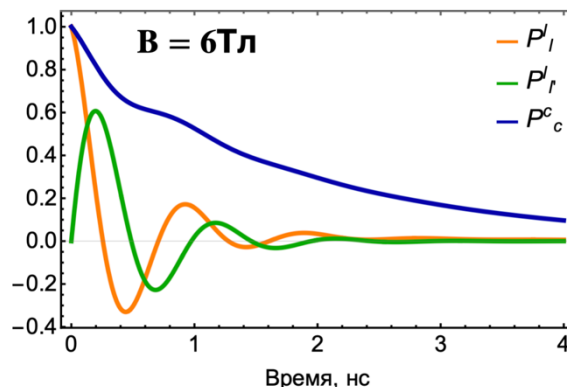
КИНЕТИКА ЭФФЕКТОВ ОПТИЧЕСКОЙ ОРИЕНТАЦИИ И ОПТИЧЕСКОГО ВЫСТРАИВАНИЯ ЭКСИТОНОВ В КОЛЛОИДНЫХ НАНОПЛАТЕЛЕТАХ CdSe/CdS

Смирнова О. О.¹, Родина А. В.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия, smirnova.olga248@gmail.com

Изучение поляризации экситонной фотолуминесценции (ФЛ) коллоидных наноплателетов CdSe/CdS, в которых впервые для подобных наноструктур наблюдались эффекты оптического выстраивания и оптической ориентации экситонов [1], открывает доступ к параметрам их тонкой структуры, а также ко времени спиновой релаксации экситонов, которое может быть анизотропным.

В данной работе представлен теоретический анализ кинетик эффектов оптического выстраивания, поворота плоскости линейной поляризации и оптической ориентации экситонов в магнитном поле в геометрии Фарадея. Модель учитывает влияние анизотропией формы наноплателетов в плоскости [2] (расщепление между линейно поляризованными состояниями светлого экситона), а также отличие времен продольной и поперечной спиновой релаксации. Сравниваются эффекты в одиночных наноплателетах и в ансамбле с их произвольной ориентацией в плоскости подложки. На рисунке показаны характерные кинетики эффектов от ансамбля в поле 6 Тл. В магнитном поле учащаются осцилляции, появляются дополнительные вклады в эффекты оптического выстраивания и оптической ориентации. При этом поворот плоскости линейной поляризации становится ненулевым. Рассматривается влияние возможной дисперсии наноплателетов по размерам в плоскости и экситонных g -факторов.



Обработка экспериментальных данных для поляризованных кинетик ФЛ позволит уточнить экситонные параметры, согласованно описать временные зависимости и стационарные зависимости поляризаций ФЛ от величины магнитного поля в геометрии Фарадея [1].

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 19-52-12064).

Литература

1. Smirnova O.O. // arXiv:2212.06134v1. – 2022.
2. Goupalov S.// Phys. Rev. B. – 2006. – 74. – 113305.

COMPUTER DESIGN OF NEW ELECTROLYTES FOR SOLID-STATE BATTERIES**Chepkasov I.V. , Maltsev A.P., Oganov A.R.**

Skolkovo Institute of Science and Technology, Bolshoy Boulevard 30, bld. 1, Moscow 121205, Russia

We aim to find all stable phases in the specified systems (Li-O-F, Li-O-Cl, Li-O-Br, Li-O-B, Li-O-I, Li-S-F, Li-S-Cl, Li-S-Br, Li-S-I, Li-O-S-F, Li-O-S-Cl, Li-O-S-Br, Li-O-S-I, Li-P-S, Na-P-S, K-P-S) – and if possible also low-energy metastable ones. All of these systems are very complex and it is tempting to use data mining as a cheap method, but its use has to be benchmarked. As an alternative, much more expensive and reliable USPEX searches can be used. We used two most famous databases - Materials Project and OQMD. To find out which phases are stable, we combined the data from Material Database and OQMD and built a joint convex hull using our USPEX-code. For this, all known stable and metastable phases from databases were added in the USPEX input file, and after optimization, we built a convex hull of the systems under consideration.

To search new compounds of phase with Li we used the USPEX code. All required compositions were considered. For each composition we calculated no less than 20 generations, each generation of 300 new configurations. All configurations from MP and OQMD data bases were included in the first generations as seeds. Several new phases have been found.

Conclusion

1. Neither of the popular data mining approaches, Materials Project and OQMD, gives correct and complete phase diagram for our systems of interest.
2. The use of USPEX allows you to find a large number of phases, both already known and completely new. While for stable phases the combination of databases seems to give a nearly complete picture, for metastable phases the use of USPEX gives numerous low-energy phases.

We acknowledge funding from Russian Science Foundation (grant no. 22-73-00219)

ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИФФУЗИОННЫХ СКАЧКОВ АТОМОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Бобокамбарова М. А.¹, Назаров А. В.^{1,2}

¹Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, Россия,

²Национальный Исследовательский Центр “Курчатовский институт”, Москва

В настоящее время молекулярная динамика (МД) является наиболее подходящим методом для получения информации на атомном уровне. Однако моделирование диффузии с помощью МД сталкивается с некоторыми трудностями при реализации. В частности при моделировании диффузии методами МД и молекулярной статистики (МС) при использовании одних и тех же потенциалов найденные значения энергии миграции заметно различаются [1]. В работе обсуждаются особенности моделирования скачков атомов и предлагается новый подход (модель естественного термостата), который полностью учитывает флуктуационный характер атомных скачков. Кроме того, комбинации МД и модифицированного метода МС [2] позволила в рамках этой модели учесть тепловое расширение решетки. С помощью разработанной модели изучаются особенности диффузии атомов и вакансий в ОЦК металлах (Fe, W) при различных температурах с использованием многочастичных потенциалов [3,4]. Получены энергия миграции и предэкспоненциальный множитель, а также проведено сравнение рассчитанных диффузионных параметров с результатами работ других авторов, которые применяли различные методы моделирования. Дальнейшее развитие модели позволило учитывать влияние давления на диффузионные скачки атомов.

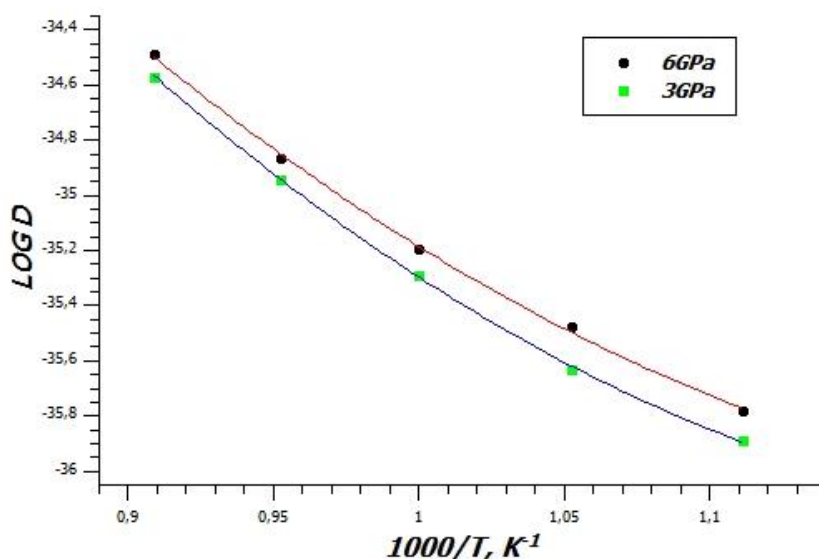


Рис. Зависимость коэффициента диффузии вакансий в ОЦК железе от температуры при различных давлениях.

Литература

1. Mikhin A.G., Osetsky Yu.N. // J. Phys.: Condens. Matter, 1993, **5**, p. 9121.
2. Valikova I.V., Nazarov A.V. // Defect Diffus. Forum, 2008, **277**, p. 125.
3. Ackland G.J., Bacon D.J., Calder A.F., Harry T. // Phil. Mag. A, 1997, **75**, № 3, p. 713
4. Derlet P.M., Nguyen-Manh D., Dudarev S.L. // Phys. Rev. B, 2007, 76.

КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ МОДУЛИ УПРУГОСТИ ГОЛУБЫХ ФАЗ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ И ИХ СВЯЗЬ С МОДУЛЯМИ ФРАНКА

Дмитриенко В. Е.¹, Мамонова А. В.¹, Чижигов В. А.¹

¹*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия
dmitrien@crys.ras.ru*

Голубые фазы – это самоорганизующиеся трёхмерные кристаллические структуры в хиральных жидких кристаллах, обычно с кубической симметрией [1,2]. Большой вклад в исследование их физических свойств внесли сотрудники ИФТТ [3-7]. Так как типичные периоды этих кристаллов порядка нескольких тысяч ангстрем, их предполагается использовать в качестве фотонных кристаллов, электрооптических элементов, дисплеев и т.п. [8,9]. Оптические свойства голубых фаз изучены весьма основательно [1,3-7], но остаётся много нерешённых фундаментальных проблем в понимании их упругих, электроупругих, вязкоупругих, оптоупругих свойств.

В настоящем докладе рассматриваются различные подходы к теоретическому описанию физики упругих взаимодействий в голубых фазах. Эти подходы базируются на функционале Ландау-де Жена [1,2], параметрами которого являются жидкокристаллические модули Франка. В простейшем градиентном приближении получены выражения, связывающие макроскопические упругие модули всестороннего сжатия и сдвигов для двух типов кубических голубых фаз ВРІ и ВРІІ с модулями Франка. Обсуждаются также возможные методы измерения упругих модулей, в частности, по тепловому диффузному рассеянию света вблизи брэгговских пиков, подобно тому, как упругие модули обычных кристаллов измеряются по тепловому диффузному рассеянию рентгеновских лучей.

Литература

1. Беляков В.А., Дмитриенко В.Е. // УФН. – 1985. – Т. 146. – № 3. – С. 369-415.
2. Wright D.C., Mermin N.D. // Rev. Mod. Phys. – 1989. – Т. 61. – № 2. – С. 385-433.
3. Демихов Е.И., Долганов В.К., Крылова С.П. // Письма в ЖЭТФ. – 1985. – Т. 42. – № 1. – С. 15-17.
4. Беляков В.А., Демихов Е.И., Дмитриенко В.Е., Долганов В.К. // ЖЭТФ. – 1985. – Т. 89. – № 6. – С. 2035-2051.
5. Демихов Е.И., Долганов В.К., Крылова С.П. // ЖЭТФ. – 1987. – Т. 93. – № 5. – С. 1750-1756.
6. Demikhov E.I., Dolganov V.K. // Il Nuovo Cimento D. – 1990. – Т. D12, – С. 1335–1342.
7. Долганов В.К. // ЖЭТФ. – 1995. – Т. 108. – № 2. – С. 593-603.
8. Guo D.Y. *et al.* // Nature Materials. – 2020. – Т. 19, – С. 94–101.
9. Hu W. *et al.* // Nature Communications. 2021. – Т. 12, article number: 1440.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ФОРМИРОВАНИЕ И СВОЙСТВА ВОДОРАСТВОРИМЫХ КРИСТАЛЛОВ.

**Винокуров С.А., Классен Н.В., Цебрук И.С., Орлов А.Д., Кедров В.В.,
Киселев А.П.**

*Институт физики твердого тела Российской академии наук, Черноголовка, Россия,
sergvin@issp.ac.ru*

Вода - сильный растворитель ионных кристаллов, благодаря большим дипольным моментам ее молекул, эффективно связывающимися с ионами. Но, с другой стороны, эти дипольные моменты определяют высокую диэлектрическую проницаемость свободной воды, за счет чего при приложении к раствору относительно слабого электрического поля (порядка 100 в/см) связи воды с ионами разрываются, растворимость уменьшается и происходит кристаллизация. При такой электрокристаллизации растворенных в воде бромида лантана, иодида и сульфата цезия наблюдаются несколько особенностей. Во-первых, высокая скорость кристаллизации (в постоянном поле – до 50 микрон в секунду, а в переменном кристаллизация становится лавиноподобной и ее скорость возрастает более чем в 200 раз. Варьирование пространственным распределением поля позволяет регулировать форму кристаллов (иглы, стрелки, пластины и др.). Водорастворимые кристаллы гигроскопичны, но электрическое поле удаляет из них гидратную воду, что улучшает ряд характеристик (например, эффективность люминесценции). При достижении определенного размера кристалла, растущего в электрическом поле, возникают автоколебания типа рост – растворение с периодом от долей секунды до десятков секунд. Приложение электрического поля к смеси из водного раствора ионного кристалла и органического раствора полимера (например, полистирола) индуцирует формирование смешанных кристаллов типа органика – неорганика, обладающих при определенном подборе режима улучшенными характеристиками. Например, можно устранить хрупкость и гигроскопичность галоидных кристаллов при сохранении их люминесцентных свойств.

Сильное влияние электрических воздействий на процессы кристаллизации из водных растворов обусловлено, прежде всего, резким различием диэлектрической проницаемости свободной и связанной в гидратные оболочки воды (у свободной она сильнее более чем на порядок). Поэтому приложение электрического поля к водному раствору ионного кристалла для понижения электростатической энергии разрушает гидратные оболочки ионов с переходом раствора в пересыщенное состояние и быстрым развитием кристаллизации. Этот процесс зависит от характера перемещений освобожденных ионов в электрическом поле. Постоянное поле стремится разделить положительные и отрицательные ионы, замедляя их соединение в кристалле. Поэтому при электроиндуцировании кристаллизации из водного раствора в переменном поле происходит гораздо быстрее, чем в постоянном той же амплитуды. С другой стороны, само формирование кристалла ослабляет электрическое поле вокруг него, за счет чего кристаллизация может смениться растворением с генерацией автоколебаний. Внесение в кристаллизующийся раствор полимерных молекул расширяет возможные многообразия формируемых структур за счет взаимосвязи ориентаций поля и молекул. Сильные корреляции пространственных и динамических характеристик распределения поля и геометрии кристаллизации позволяет регулировать состав и морфологию формируемых в электрическом поле структур.

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ И ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В ПЕНТАОКСИДЕ ВАНАДИЯ ИНТЕРКАЛИРОВАННОМ ЛИТИЕМ

Савин А. В.¹, Рогинский Е. М.¹

¹Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия,
aleksandr.savin@mail.ioffe.ru

В сфере развития возобновляемой энергетики самым проблемным является вопрос эффективного накапливания энергии и использования её по мере необходимости. Однако проблема выбора оптимального материала для катода до сих пор остаётся нерешенной. Наиболее широко в промышленном производстве таких аккумуляторов в качестве катодного материала используют слоистые кристаллы Li_xMO_2 (здесь М – атом переходного металла), например катод из LiFePO_4 обеспечивает ёмкость 165 mA h/g [1]. Альтернативой может служить наиболее термодинамически устойчивый оксид ванадия V_2O_5 , который имеет слоистую кристаллическую структуру, что определяет его привлекательность в качестве катодного материала.

Структура интеркалированного атомами лития, синтезированного химически с помощью окислительно-восстановительной реакции иодида лития и пентоксида ванадия была определена экспериментально с помощью рентгеноструктурного анализа [2]. Однако, при определении пространственного упорядочения не удалось, основываясь только на рентгеноструктурных данных, однозначно установить группу симметрии. С целью устранения неоднозначности были выполнены первопринципные расчеты динамики решетки. В результате оптимизации структурных параметров дельта фазы пентоксида ванадия интеркалированного атомами лития $\delta\text{-LiV}_2\text{O}_5$ показано, что структура сохраняет свою слоистую природу. Расчёт фонового спектра центросимметричной структуры выявил наличие мнимых мод, что указывает на её нестабильность, что инициировало поиск устойчивой конфигурации. В результате найдена структура с устойчивыми динамическими свойствами.

Согласно фазовой диаграмме при температуре 100°C происходит плавное изменение структурных параметров ванадиевой бронзы приводящее, в конечном итоге к новой структуре – эпсилон фазе. Расчет динамических свойств $\varepsilon\text{-LiV}_2\text{O}_5$ в пространственной группе без центра инверсии продемонстрировал устойчивость структуры по отношению к колебательным состояниям.

В фоновом спектре дельта фазы обнаружено низкочастотное колебание на границе Зоны Бриллюэна, которое соответствует коллективному противофазному колебанию атомов в соседних слоях, причем данное колебание отсутствует в высокотемпературной фазе. Показано, что искажение структуры дельта фазы вдоль низкочастотного колебания приводит к взаимному смещению соседних слоев, в результате чего нарушается пространственная структура и индуцируется структурный фазовый переход в эпсилон фазу. Для экспериментального подтверждения фазового перехода был выполнен расчет спектра комбинационного рассеяния, в котором обнаружены характерные особенности для каждой из фаз.

В результате в рамках теории функционала плотности выполнен расчёт динамических свойств дельта и эпсилон фаз пентоксида ванадия интеркалированного литием, предложена микроскопическая модель фазового перехода, сопровождаемого изменениями в спектрах комбинационного рассеяния.

Литература

1. Tarascon, J.-M., Armand, M. // Nature. – 2001. – № 414. С. – 359-367.
2. Millet, P. [et al] // J. Solid State Chem. – 1998. – № 136. – С. 56-62.

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ОСОБЕННОСТИ КОРОТКОПЕРИОДНЫХ СВЕРХРЕШЕТОК Si/SiO₂**Рогинский Е. М.¹, Смирнов М. Б.², Савин А. В.¹, Панькин Д. В.²**¹*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия,
e.roginskii@mail.ioffe.ru*²*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

Ключевым элементом МОП-транзисторов, наиболее широко используемых элементов современной электроники, является интерфейс оксид-полупроводник. В кремниевой электронике в качестве оксида преимущественно используют SiO₂. Требование миниатюризации ставит перед технологами задачу получения ультратонких оксидных слоев, что делает актуальной проблему понимания законов, управляющих формированием интерфейсов на атомном уровне. Известно, что изучение структурных параметров с помощью динамических свойств успешно выполняется с спектроскопическими методами. Рамановская спектроскопия доказала свою эффективность как весьма информативный и чувствительный метод неразрушающего анализа структуры полупроводниковых СР [1]. Однако, детального, основанного на строгих квантовомеханических расчетах, теоретического анализа полученных спектров до сих пор никто не проводил. Понимание связи структура-свойства невозможно без проведения теоретических исследований, основанных на высокоточных расчётах электронной структуры. Сегодня наиболее надёжные методы моделирования электронной структуры конденсированных сред основаны на расчётах в рамках теории функционала плотности.

В работе были рассмотрены различные модификации сверхрешёток (СР) Si/SiO₂. При выборе пространственной модели СР чаще всего используют интерфейсы, образованные поверхностями (001) кристаллов кремния и β-кristобалита. Такой подход хорошо себя зарекомендовал подтверждением чему является целый ряд публикаций. Нами было выполнено моделирование гетероструктур на основе кубического кремния "сращённого" с альфа фазой кристобалита оксида кремния. Методом компьютерного моделирования с применением неэмпирических квантово-механических расчётов, выполнена оптимизация структурных параметров, за которой произведён расчёт динамических свойств. В фоновом спектре выявлены мнимые моды, указывающие на нестабильность начальной структуры. Однако, небольшие искажения структуры вдоль мнимых мод позволило найти устойчивую фазу. Аналогичные исследования были выполнены для структур, повернутых на 45 градусов вдоль оси 4-го порядка кристобалита и структур с кислородной вакансией.

Основной результат настоящей работы состоит в том, что впервые с применением неэмпирических расчетных методов компьютерного моделирования найдены устойчивые структуры СР Si/SiO₂ с резким интерфейсом. Изучены фоновые состояния, ИК и КР-спектры, в которых обнаружены характеристические линии, по которым можно установить наличие в исследуемых образцах интерфейсов данного типа.

Литература

1. Benyoucef, M., Kuball M., Sun J. M., Zhong G. Z., Fan X. W. // J. Appl. Phys. – 2001. – № 89. С. – 7903-7909.

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА СМАЧИВАНИЯ КАРБИДА КРЕМНИЯ РАСПЛАВАМИ ПРИПОЕВ СИСТЕМЫ Zr-(Ti)-Cu-Be

Чернавская Е. Р., Иванников А. А., Федотов И. В., Севрюков О. Н.
 Национальный исследовательский ядерный университет, Москва, Россия,
 ekat_rom_form@mail.ru

В настоящее время активно разрабатываются керамические композиты из карбида кремния (SiC), являющиеся перспективными материалами для оболочек твэлов, толерантных к авариям ЛОСА. Но современные технологии не позволяют создавать изделия больших размеров или сложной геометрии из композитного SiC. Эта проблема может быть решена при использовании метода пайки. Перспективными являются активные припои, например Zr-Cu и Zr-Ti-Be. Обнаружено, что в системе Ti-Zr-Cu-Be наиболее легкоплавкий сплав имеет состав $Zr_{35}Ti_{25}Cu_{12}Be_{28}$ (ат.%) с $T_S=673$ °C и $T_L=711.4$ °C [1]. Сплав $Zr_{60}Cu_{12}Be_{28}$ (ат.%) должен обладать большей стойкостью к термоциклированию, чем $Zr_{35}Ti_{25}Cu_{12}Be_{28}$, за счет исключения возможности образования охрупчивающих паяных шов карбосилицидов титана [2]. В качестве исследуемых припоев для пайки SiC выбраны аморфные ленты из этих сплавов.

Как известно, для получения прочного соединения необходимо соблюдение нескольких условий, одним из которых является хорошее смачивание припоем материала-подложки, т. е. значение краевого угла смачивания $\theta < 90^\circ$. В данной работе изучено растекание расплавов припоев $Zr_{35}Ti_{25}Cu_{12}Be_{28}$ и $Zr_{60}Cu_{12}Be_{28}$ на подложке из карбида кремния в соответствии с ГОСТ 23904–79. Испытания проводили в вакуумной печи. Для эксперимента использовали заготовки припоев объемом 64 мм³. С использованием видеокамеры измерен краевой угол смачивания in-situ в диапазоне 710–810 °C для $Zr_{35}Ti_{25}Cu_{12}Be_{28}$, и 850–900 °C для $Zr_{60}Cu_{12}Be_{28}$. Далее с использованием метода микрорентген-спектрального анализа остывших капель изучено взаимодействие припоев с подложкой.

Ceramic composites from sic are a promising material for fuel element shells tolerant to LOCA. But modern technologies don't allow creating products of large sizes or complex geometry from composite SiC. This problem can be solved by using the brazing method. It was discovered that the most fusible alloy in the Ti-Zr-Cu-Be system has the composition $Zr_{35}Ti_{25}Cu_{12}Be_{28}$ (at.%) with $T_S=673$ °C and $T_L=711.4$ °C [1]. The alloy $Zr_{60}Cu_{12}Be_{28}$ (at.%) should have greater resistance to thermal cycling than $Zr_{35}Ti_{25}Cu_{12}Be_{28}$ due to the exclusion of the possibility of the formation of titanium carbosilicides embrittling the joint [2]. Amorphous tapes from these alloys were selected as the investigated solders for soldering SiC.

Good wetting of the substrate material with solder is an important condition for obtaining a strong joint. In this work, we studied the spreading of melts of $Zr_{35}Ti_{25}Cu_{12}Be_{28}$ and $Zr_{60}Cu_{12}Be_{28}$ filler metals on a SiC substrate in accordance with GOST 23904–79. The tests were carried out in a vacuum furnace. For the experiment, solder blanks with a volume of 64 mm³ were used. Using a video camera, the in-situ wetting edge angle was measured in the range of 710-810 °C for $Zr_{35}Ti_{25}Cu_{12}Be_{28}$, and 850-900 °C for $Zr_{60}Cu_{12}Be_{28}$. Further, using the method of micro-X-ray spectral analysis of cooled drops, the interaction of solders with the substrate was studied.

Литература

1. A. Wiest, G. Duan, M.D. Demetriou, L.A. Wiest, A. Peck, G. Kaltenboeck, B. Wiest, W.L. Johnson, Zr-Ti-based Be-bearing glasses optimized for high thermal stability and thermoplastic formability, Acta Mater. 56 (2008) 2625–2630.
2. Изучение эволюции структурно-фазового состояния паяных соединений SiC/SiC при высокотемпературной термической обработке\ Чернавская Е.Р., Иванников А.А., Федотов И.В. и др.\ Новые материалы: перспективные технологии получения и методы исследования – 2022. – с. 211-212.

РЕНТГЕНОВСКАЯ ДИАГНОСТИКА ПОДЛОЖЕК КАРБИДА КРЕМНИЯ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ГРАФЕНОВЫХ СТРУКТУР

Рошин Б.С.¹, Асадчиков В.Е.¹, Аргунова Т.С.², Волков Ю.О.¹, Нуждин А.Д.¹

¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия, ross@crys.ras.ru

²Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

Одним из методов получения графена является графитизация поверхности подложек карбида кремния (SiC). Для достижения высокого качества графена с поверхности коммерческих подложек SiC удаляют остаточный нарушенный слой. Одним из возможных методов дополнительной обработки поверхности является травление в вакууме при высоких температурах. Ввиду небольшой разориентации поверхности по отношению к кристаллическим плоскостям, на поверхности в результате обработки образуется террасно-ступенчатая структура. Подложки с таким рельефом представляют помимо технологического, также научный и методический интерес [1, 2]. По данным атомно-силовой микроскопии, высота ступеней не превышает 5 нм при периоде в несколько мкм.

Для наиболее полной характеристики параметров нанорельефа подложек применен метод рентгеновского рассеяния в условиях полного внешнего отражения. В рамках использованного подхода, результатом измерения является функция спектральной плотности мощности высот шероховатости [3]. Интеграл от данной функции по доступному диапазону пространственных частот даёт эффективную высоту шероховатости. Для исследованных подложек данная величина составила 0.9 ± 0.06 нм. Вследствие того, что исследованный рельеф является анизотропным, вид полученных функций спектральной плотности мощности меняется в зависимости от направления распространения рентгеновского пучка по отношению к направлению ступеней. В ряде случаев на функциях проявляется пик, положение максимума которого соответствует пространственной частоте среднего значения периода структуры – 1.85 мкм. Показано, что в том случае, когда пучок направлен перпендикулярно ступеням, пик полученной на функции спектральной плотности мощности имеет наименьшую ширину. По этой величине был оценен разброс периода структуры, который составил 4.2 мкм. Кроме того, функции спектральной плотности мощности были рассчитаны по данным атомно-силовой микроскопии, продемонстрировав хорошее согласие с данными рентгеновского рассеяния.

Таким образом, на примере наноструктурированных подложек SiC показан взаимодополняющий характер данных, получаемых с помощью рентгеновских и зондовых методов, а также учтены особенности сопоставления их результатов.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части проведения рентгеновских исследований.

Литература

1. Rosei F. // J. Phys. Condens. Matter. – 2004. – V. 16. – P. S1373–S1436.
2. Roschin B.S., Argunova T.S., Lebedev S.P., Volkov Y.O., Nuzhdin A.D., Asadchikov V.E., Lebedev A.A. // Materials. – 2022. – Vol. 15. – Article No. 7669.
3. Asadchikov V.E., Kozhevnikov I.V., Krivososov Y.S., Mercier R., Metzger T.H., Morawe C., Ziegler E. // Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. A. – 2004. – V. 530. – P. 575–595.

ПОЛУПРОВОДНИКИ СО СТРУКТУРНЫМ ФАЗОВЫМ ГРАДИЕНТОМ**Батталова Э. И.¹, Харинцев С. С.¹**¹*Казанский федеральный университет, Казань, Россия, eibattalova@stud.kpfu.ru*

Дефекты кристаллической решётки оказывают существенное влияние на оптические и электронные свойства полупроводников [1]. Точечные структурные дефекты способны существенно ослабить фотолюминесценцию или оптическое поглощение. Вместе с тем, изменяя электронную структуру полупроводника, можно добиться того, что энергетические уровни дефектов сместятся за пределы запрещённой щели. В таком случае дефекты могут выступать в роли оптических нанопризм, способных увеличивать локальную плотность электромагнитных состояний. Концентрация дефектов в полупроводниках изменяется при фазовых переходах второго рода. Её можно настраивать путём контролируемого изменения температуры. В настоящей работе демонстрируется градиентная фазовая структура микрокристаллов неорганических галоидных перовскитов CsPbBr₃. Градиентная фазовая структура полупроводника содержит несколько его кристаллических фаз. Она получена с помощью термоплазменной метаповерхности. Термоплазменная метаповерхность обеспечит локальный оптический нагрев при её освещении лазерным светом [2]. Помещая кристалл CsPbBr₃ на такую метаповерхность, можно управлять его температурой за счёт изменения интенсивности падающего света. Это позволяет настраивать фазовую структуру кристалла, переводя его в многофазное состояние. В такой системе дефекты выступают в роли зарядовых аттракторов, благодаря чему усиливается квантовый выход фотолюминесценции.

Литература

1. Queisser H. J., Haller E. E. // Science. – 1998. V. 281– № 5379. P. – 16-23.
2. Kharintsev S.S., Kharitonov A.V., Chernykh E.A., Alekseev A.M., Filippov N.A., Kazarian, S.G. // Nanoscale. – 2022. – V. 14. – № 33. – P. 12117-12128.

КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ТЕОРИЯ ДЕЛОКАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ В НАНО-КРЕМНИИ

Мухтаров А.П.

Институт ядерной физики АН РУз, Ташкент, Узбекистан, amukhtarov@gmail.com

В последнее время кремниевые нанотрубки вызывают огромный интерес в связи с обнаружением уникальных свойств, которые открывают широкие возможности дальнейшей миниатюризации в электронике и фотонике, использования в качестве квантовых точек в различных устройствах и другие. Природа необычных свойств кремниевых нанотрубок (Si НТ) обусловлено характером межатомных связей и состоянием электронных орбиталей на поверхности нанотрубок. Однако, в существующей литературе отсутствует исследования, связанные с механизмом делокализации электронов химических связей и их связь со свойствами нанотрубок кремния.

В данной работе мы приводим количественную теорию делокализации электронов на поверхности трубки с использованием метода функционала локальной плотности с обменно-корреляционным потенциалом Бекке-Пердю в базисе валентных двойных дзета с поляризационными функциями. Ранее нами было выявлено, что для (n,n) - Si НТ, шероховатая форма является энергетически более выгодной, тогда как в случае (n,0) - Si НТ гладкая поверхность оказалось более устойчивой. Поверхностная структура различных форм Si НТ объясняется количественной теорией электронной делокализации атомов кремния.

Для определения степени делокализации электронов нами был введен расширенный индекс Вайберга-Майера (PBM), который представляет собой сумму всех индексов ВМ для рассматриваемой системы электронов. Индекс ВМ был вычислен с использованием программы JANPA [1] на базе набора натуральных и оптимизированных по свойствам локализованных орбиталей (CLPO). Сумма всех индексов ВМ связей атома ($ВМ_{общ}$) показывает степень участия электронов его внешней оболочки в образовании связей. Степень делокализации связанных электронов данного атома (СД) равна разности $ВМ_{общ}$ и суммы всех ВМ с первыми соседями ($ВМ_{соседи}$). Разница между полным зарядом валентной оболочки атома (Z) и $ВМ_{общ}$ дает количество (СН) электронов атома, не участвующих в образовании связей. Сумма СН по всем атомам равна общему количеству валентных электронов, оставшихся в радикальном состоянии. В таблице приводятся данные для Si НТ разного диаметра.

	$NP_{заряд}$	$ВМ_{общ}$	$ВМ_{соседи}$	СД	СН
(3,0)	4,00	3,86	3,05	0,81	0,14
(5,0)	4,00	3,97	3,51	0,46	0,03
(7,0)	4,00	4,00	3,66	0,34	0

В (3,0) высокое значение СД объясняется большим значением СН, т.е. высокое содержание несвязанных электронов приводит к резкому увеличению степени делокализации СД.

Литература

1. Николаенко Ю., Булавин Л.А., Ховорун Д.М. // Выч.и теор.химия. - 2014. - Т.1050. - С.15-22.

ОСОБЕННОСТИ ДЕФОРМАЦИОННОГО ОБРАЗОВАНИЯ СВЕРХСТРУКТУР В КОМПОЗИЦИЯХ ОРГАНИКА – НЕОРГАНИКА

Цебрук И.С., Винокуров С.А., Классен Н.В., Кедров В.В., Киселев А.П., Покидов А.П.

*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка
cebruk@issp.ac.ru*

Ранее нами в композициях из органических люминофоров и сцинтилляционных наночастиц была показана возможность улучшения радиационных детекторов за счет активизации обмена электронными возбуждениями в наноструктурах. В данной работе путем деформирования композиций органика – неорганика активируется взаимодействие между атомами этих компонентов, образующее качественно новые сверхструктуры.

Указанные композиции формировались двумя взаимно дополняющими методиками. Первая – внедрение в матрицы из неорганических кристаллов полимерных молекул. Применение этой методики традиционным путем термодиффузии не реально, т.к. все полимеры при нагревах до температур, необходимых для диффузии, разлагаются. Но это стало возможным путем деформационного легирования, когда внедрение легирующего компонента производится шариковой обкаткой поверхности легируемого материала с нанесенным на нее слоем органики. При внедрении таким образом полистирола в гораздо более твердые хлористый калий и иодистый цезий оказалось, что молекулы полистирола образуют прямые тонкие нити, входящие в кристаллы перпендикулярно поверхности на глубину в несколько десятков микрон. Такая морфология показывает, что полимерные молекулы не вдавливаются, а втягиваются в твердые неорганические кристаллы. То есть деформирование контактов между полимером и кристаллом активировало взаимное притяжение между их атомами, вызвавшее втягивание полимера в глубину. Группы втягиваемых таким образом молекул образуют в приповерхностном слое квазипериодические структуры, периоды которых можно регулировать вариациями скорости и величины давления на шарик при обкатке. Исследование оптических свойств, полученных таким образом сверхструктур показало, что основные оптические характеристики внедряемого полимера можно сохранить (например, световыход люминесценции).

Вторая применяемая нами методика образования сверхструктур деформированием композиций органика – неорганика – вытягивание микроволокон из растворов полистирола с внесенными туда частицами бромида лантана, иодида или сульфата цезия. Вытягивание проводилось механически центрифугированием или зацеплением раствора на стеклянный стержень, либо же электрически (электроспиннингом), когда раствор заливается в шприц и вытягивается из него на металлическую подложку приложением между ней и иглой высокой разности потенциалов. Во всех этих ситуациях деформирование композиции производится за счет быстрого затвердевания вытягиваемой струи раствора. Активацией взаимодействия между атомами органики и неорганики при варьировании условий вытягивания можно было образовывать микроволокна с регулируемыми сверхструктурами из полимерных молекул и неорганических наночастиц. Такое многообразие вариаций внутренней структуры и внешней морфологии открывает возможности создания и лазерных систем с распределенной обратной связью, и оптических линий задержки с регулируемой фазой выходящей волны, и других устройств, востребованных оптоэлектроникой.

УПРУГАЯ ЭНЕРГИЯ КРАЕВОЙ ДИСЛОКАЦИИ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМАХ

Петров Д. А.¹, Гуткин М. Ю.^{1,3}, Колесникова А. Л.^{2,3}, Романов А. Е.³

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия, petrov3.da@edu.spbstu.ru

²Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

³Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Дислокации оказывают большое влияние на физические свойства низкоразмерных систем. Наличие дислокаций во многом определяет упругую энергию таких систем, причем величина этой энергии существенно зависит от формы свободной поверхности системы. Вычисление упругой энергии требует решения соответствующих граничных задач теории упругости для дислокаций.

В настоящем докладе представлено решение задачи о прямолинейной краевой дислокации, проходящей через центр сплошного упругоизотропного шара со свободной поверхностью. Идея решения заключается в представлении вектора перемещения $\mathbf{u}^\perp = \mathbf{u}^\infty + \mathbf{u}$ как суммы известного решения в бесконечной среде \mathbf{u}^∞ [1] и дополнительного слагаемого \mathbf{u} , обеспечивающего выполнение граничных условий на свободной поверхности шара. Построение вектора \mathbf{u} осуществляется с помощью классического метода решения граничных задач для упругого шара [2]. Результаты представлены в виде аналитических выражений для полей перемещений и напряжений и проиллюстрированы картами напряжений в разных сечениях шара. Показано, что строгий учет свободной поверхности шара приводит к качественным отличиям в полях напряжений по сравнению со случаем бесконечной среды: напряжения меняют знак при удалении от линии дислокации в одном направлении.

На основе полученного решения граничной задачи найдено аналитическое выражение для упругой энергии дислокации в шаре, которое можно представить в следующем компактном виде: $W = Db^2 [\ln(R/r_c) - g(\nu)]$, где $D = G/[2\pi(1-\nu)]$, G – модуль сдвига, ν – коэффициент Пуассона, R – радиус шара, r_c – радиус ядра дислокации, $g(\nu)$ – числовая функция (см. рис. 1). Вид выражения для W позволяет провести сравнение с другими известными решениями для краевых дислокаций в низкоразмерных системах со свободной поверхностью: в цилиндре [3] и в слое конечной толщины [4]. Показано, что снижение средней погонной упругой энергии дислокации в шаре радиусом R за счет свободной поверхности при $\nu = 0.3$ примерно в полтора раза больше, чем в случае дислокации в цилиндре радиусом R , и примерно в 2–3 раза больше, чем в случае дислокации в центре слоя толщиной $2R$, в зависимости от ориентации ее вектора Бюргерса – параллельно или перпендикулярно поверхности слоя (см. рис. 1).

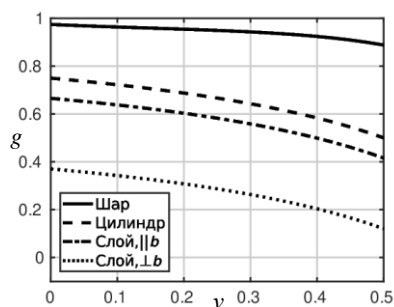


Рис. 1. График функции $g(\nu)$ для разных систем

Литература

1. Де Вит Р., Континуальная теория дисклинаций. – М.: Мир, 1977, 208 с.
2. Лурье А.И., Теория упругости. – М.: Наука, 1970, 940 с.
3. Eshelby J. D., in: Dislocations in Solids, Vol.1, Ed. by F.R.N. Nabarro. – 1979. – P. 167-221.
4. Gutkin M.Yu., Romanov A.E. // Phys. stat. sol. (a). – 1992. – Vol. 129. – No. 2. – P. 363-377.

MICROPOROUS ACTIVATED CARBON FROM TEXTILE WASTE AS SUPERCAPACITOR ELECTRODE MATERIAL

Thach N.K.¹, Berestov V.V.², Krechetov I.S.²

¹*NUST MISIS, Moscow, Russia, nguyenkienthach@gmail.com*

²*NUST MISIS, Moscow, Russia, vberestov@misis.ru*

During the last years, there has been a growing research interest in the creation of highly porous activated carbons (AC) from biomass, especially from agricultural waste: remains of rice husks, waste from cotton and textile production, etc. ACs are widely used as adsorbents for water purification, removal of toxic gases from the environment, and also for the creation of electrodes for double-layer electrochemical supercapacitors (SC). SCs are devices for the accumulation and storage of electrical energy, which are used in power electronics, electric vehicles, power grids, etc. The purpose of this work was to obtain AC from textile production waste – waste cotton – and to study its textural and adsorption characteristics, as well as electrochemical properties as a material for electrodes of a double-layer SC.

AC was obtained from cotton waste impregnated with a 5 % H₃PO₄ aqueous solution by carbonization in an Ar flow (0,8 L/min) and physical activation in a CO₂ flow (0,2 L/min) with an extremely high heating rate for both processes (up to 585 °C/min and 751 °C/min, respectively). The obtained AC was grinded and mixed with carbon black and an aqueous PTFE suspension in the presence of ethanol until a homogeneous mass was obtained. The mass then was rolled to obtain an SC electrode material in the form of a tape. Electrodes were cut out from the tape, and were used to assemble symmetrical two-electrode SC cells in CR2032 coin cell cases.

According to the results of the study of textural characteristics by the low-temperature nitrogen adsorption method, the obtained AC has high specific surface area (2458,3 m²/g) and a large number of micropores with an average diameter of 1,8 nm. The specific area and specific volume of the micropores are 1848,5 m²/g and 1,31 cm³/g, respectively. In addition, this AC has a high adsorption on methylene blue (1042 mg/g). The electrochemical characteristics of the electrode material obtained were studied by the methods of cyclic voltammetry (CV) and galvanostatic charge and discharge (GCD) in various aqueous electrolytes. In addition, life tests were carried out for 10000 cycles with a specific current of 1 A/g. The results of electrochemical measurements by the GCD method are shown in Table 1. The material demonstrates the highest specific capacity of 176,5 F/g in an electrolyte based on an aqueous solution of 6 M KOH. Moreover the CV results show that in this electrolyte the material is characterized by the smallest drop in capacity with an increase in the scan rate.

Table 1. Electrochemical measurements results

Electrolyte	Specific capacity at 50 mA/g, F/g	Capacity drop after 10000 cycles, %
6 M KOH	176,5	<8
1 M KCl	131,7	<8
1 M KNO ₃	111,8	N/A
0,5 M K ₂ SO ₄	112,3	<8

This study was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the State assignment FSME-2023-0007.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НА МАКРОСТРУКТУРУ МУЛЬТИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ

Пещерова С.М.¹, Чуешова А.Г.¹, Пресняков Р.В.¹, Осипова Е.А.², Трухонин Д.А.², Хорошева М.А.³

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геохимии им. А.П. Виноградова Сибирского отделения Российской академии наук, Иркутск, Россия, spescherova@mail.ru

²Иркутский национальный исследовательский технический университет, Иркутск, Россия

³Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, Иркутск, Россия

Моделирование процесса направленной кристаллизации мульткристаллического кремния является важным инструментом для понимания и оптимизации процесса его производства с контролируемой микроструктурой и свойствами. Однако, прямую связь между параметрами кристаллизации и структурой (средним размером зёрен, типом границ, параметрами кристаллографической ориентации) выявить практически невозможно. Тем не менее, развитие цифровых методов анализа позволило выявить некоторые закономерности между параметрами ориентации зёрен, различными дефектами и их расположением в слитках относительно тигля: дно, центральная часть, области вблизи стенок тигля [1]. Исследования в этом направлении весьма перспективны и могут являться основой для создания так называемых «цифровых двойников», с помощью которых процесс направленной кристаллизации и формирования структуры могут стать управляемыми и прогнозируемыми на стадии моделирования.

В данной работе предложен алгоритм зонирования сканированных изображений продольных сечений слитков мульткристаллического кремния, основанный на технологиях нейронных сетей. На рис. 1 представлены результаты анализа макроструктуры слитков, выращенных с разными скоростями вращения (об/мин) перемещения тигля (мм/ч). Автоматизированная сегментация изображений позволила идентифицировать межзёренные границы, а установленные параметры ориентации зёрен - их тип [2]. Анализ множества изображений слитков позволил установить взаимосвязь между параметрами направленной кристаллизации (скоростями вращения и перемещения тигля) и распределением типов границ, а также геометрическими и кристаллографическими параметрами зёрен. Обсуждаются механизмы управления макроструктурой и подходы к реализации модели цифрового двойника процесса направленной кристаллизации.

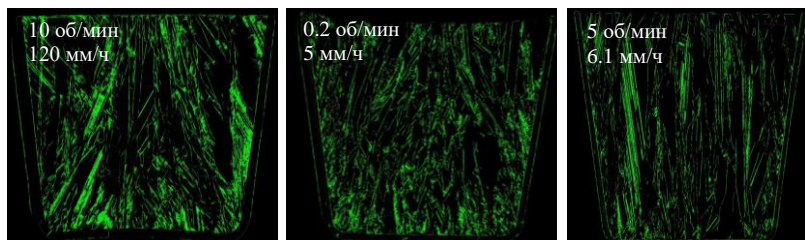


Рис. 1. Сегментированные изображения слитков мульткристаллического кремния.

Литература

1. Strauch T. et al. Analysis of grain structure evolution based on optical measurements of mc Si wafers //Journal of Crystal Growth. – 2016. – №. 454. – P. 147-155;
2. Пещерова С.М., Осипова Е.А., Чуешова А.Г и др. Метод быстрой идентификации параметров ориентации мульткристаллического кремния //Автометрия. – 2022. – №.6. – С. 54-63.

НАНОМАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ОКСИДА МЕДИ ДЛЯ ЛИТИЕВЫХ АККУМУЛЯТОРОВ

Подлеснов Е., Нигаматдянов М. Г., Слободской А. Н., Дорогов М. В
Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия, mvdorogov@itmo.ru

Оксиды меди существуют в двух различных формах: CuO и Cu₂O, в зависимости от валентного состояния меди. В нашей работе мы исследовали CuO. Оксид меди (CuO) представляет собой полупроводниковый материал р-типа с непрямой запрещенной зоны шириной 1,2–1,9 эВ [1]. Кристаллическая структура CuO относится к моноклинной пространственной группе *C2/c*; с постоянными решетки равными $a = 4,6837 \text{ \AA}$, $b = 3,4226 \text{ \AA}$, $c = 5,1288 \text{ \AA}$ и $\beta = 99,54^\circ$ [2]. Оксид меди (CuO) относительно дешев, легко смешивается с поляризованными жидкостями (например, с водой) и полимерами и относительно стабилен с точки зрения как химических, так и физических свойств [3].

В промышленности CuO широко используют в полевой эмиссии [4], сенсорике [5], катализе и фотокатализе [6], антибактериальных добавках [3] и химических источниках тока [7]. Среди различных кандидатов в материалы анодов литий-ионных аккумуляторов нового поколения оксид меди (CuO) считается многообещающим из-за его высокой теоретической емкости (670 мА·ч/г), нетоксичности, низкой стоимости и экологичности. Однако широкое практическое применение CuO затруднено из-за его низкой проводимости и большого изменения объема во время литизации/делитизации, что приводит к плохой проводимости и стабильности при циклировании.

В нашей работе мы рассматриваем простой метод синтеза наночастиц оксида меди включающий электроосаждение и термообработку. Показано влияние дефектов электролитической структуры и внутренних напряжений на рост вискероидов оксида меди. Нами исследовались наночастицы оксида меди в сферической форме и в виде нановискероидов. На основе наночастиц оксида меди готовили анодные материалы и гелевый полимерный электролит.

Электрохимические испытания анодов на основе нановискероидов оксида меди с карбоксиметилцеллюлозой в качестве связующего показали превосходное сохранение емкости ячейки в течение 50 циклов. Также стабильное циклирование и высокую емкость показала ячейка с электролитом, допированным наночастицами оксида меди (мас. 0,1%).

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект 075-15-2021-1349).

Литература

1. Ray S.C. // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. – 2001. Vol. 68. – No. 3-4. – P. 307-312.
2. Åsbrink S., Norrby L.J. // Acta Crystallogr. Sect. B Struct. Crystallogr. Cryst. Chem. – 1970. – Vol. 26. – No. 1. – P. 8-15.
3. Nanobiomaterials in Clinical Dentistry. Elsevier, 2013.
4. Hsieh C.-T., Chen J.-M., Lin H.-H., Shih H.-C. // Appl. Phys. Lett. – 2003. – Vol. 82. – No. 19. – P. 3316-3318.
5. Zhang X., Gu A., Wang G., Wang W., Wu H., Fang B. // Chem. Lett. – 2009. – Vol. 38. – No. 5. – P. 466-467.
6. Dorogov M. et al. // Mater. Sci. Technol. – 2018. – Vol. 34. – No. 17. – P. 2126-2135.
7. Hu P., Dorogov M., Xin Y., Aifantis K.E. // ChemElectroChem. – 2019. – Vol. 6. – No. 12. – P. 3139-3144.

СИНТЕЗ СУБМИКРОННЫХ БУФЕРНЫХ СЛОЕВ GAAS ДЛЯ СОЗДАНИЯ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИОННЫХ УСТРОЙСТВ НА КРЕМНИИ

Лендяшова В. В.^{1,2}, Илькив И. В.², Б.Бородин³, А.С. Драгунова², Т. Шугабаев¹,
Г.Э. Цырлин¹

¹СПбГУ, Санкт-Петербург, Россия

²СПбАУ РАН им. Ж. И. Алфёрова, Санкт-Петербург, Россия

³ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

erilerican@gmail.com

Интеграция полупроводниковых структур на основе соединений АЗВ5 на кремний представляет значительный интерес в связи с перспективами создания на их основе новых телекоммуникационных устройств [1]. Один из перспективных подходов основан на монокристаллической интеграции путем прямого синтеза АЗВ5 структур на кремниевых подложках с использованием субмикронных буферных слоев, а также использовании в качестве активной области массивов самоорганизующихся А³В⁵ квантовых точек (КТ), которые демонстрируют более интенсивное излучение по сравнению с гетероструктурами на основе квантовых ям. Настоящая работа посвящена изучению процессов формирования субмикронных GaAs слоев методом молекулярно-пучковой эпитаксии (МПЭ) на подложках кремния с последующим созданием на их основе гетероструктур с внедренными InAs КТ.

Синтез структур осуществлялся с использованием МПЭ установки Riber Comrast 21 EB200. В качестве подложек использовались пластины Si(100) с ориентацией 4°. Сначала осуществлялась химическая обработка подложек с последующим термическим отжигом в ростовой камере и формирование буферного слоя Si слоя толщиной 50 нм. После этого температура подложки понижалась до 350°C и осуществлялось формирование зародышевого GaAs слоя толщиной 150 нм. Затем был выращен слой GaAs (200 нм) при 450°C, содержащий упругонапряженный слой In_{0.1}Ga_{0.9}As. На заключительном этапе выращивался слой GaAs толщиной 0.5 мкм при 550°C, после чего осуществлялся циклический термический отжиг всей структуры. Морфология полученных структур исследовалась методом атомно-силовой микроскопии (АСМ). На полученных буферных слоях GaAs осуществлялся рост InAs гетероструктур на основе квантовых точек-квантовых ям и оценка их излучательных свойств.

В результате выполненных работ было установлено, что использование буферных Si слоев позволяет существенным образом повысить кристаллическое качество впоследствии формируемых GaAs буферных слоев. На основе полученных субмикронных буферных GaAs слоев были получены светоизлучающие структуры с достаточно высоким оптическим качеством, демонстрирующие фотолюминесценцию в области 1.2 мкм при комнатной температуре. Таким образом, полученные гетероструктуры представляют высокий интерес для создания телекоммуникационных устройств на кремнии.

Работа была выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (0791-2023-0004). Оптические измерения и исследование морфологии образцов выполнено в рамках исследовательского гранта СПбГУ № 94031047.

Литература

1. Chen X. et al.// Appl. Phys. Lett. – 2022. – № 121(6). – С. 061102.

ПРИМЕНЕНИЕ ПОРИСТЫХ СЛОЕВ НА ОСНОВЕ ОКСИДА ЦИНКА ПРИ СОЗДАНИИ ДАТЧИКА УФ-ИЗЛУЧЕНИЯ РЕЗОНАНСНОГО ТИПА

Краснова В.В.¹, Асваров А.Ш.¹

¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия, E-mail: valeriya070707@inbox.ru

Одними из главных преимуществ нанокристаллического оксида цинка является многообразие его морфологических форм (тонкие пленки, массивы вискерсов, 1D наночастицы, тетраподы и т.д.) и возможность изменения электрических свойств в широком диапазоне, как за счет легирования, так и за счет изменения состояния его поверхности [1].

Целью данной работы была разработка способа формирования на подложках пористых оксидных слоев на основе ZnO с высокой удельной поверхностью и изучение чувствительность данных слоев к воздействию УФ-излучения.

В данной работе была разработана двухстадийная методика получения пористых слоев ZnO, заключающаяся в предварительном нанесении на подложку ультрапористого композитного слоя Zn–ZnO:Ga методом магнетронного сораспыления металлической (Zn) и керамической (ZnO:3%Ga) мишеней и последующего отжига композитного слоя на воздухе. Данный способ может быть использован при создании датчика ультрафиолетового излучения резонансного типа на базе кварцевых микровесов QCM200, принцип работы которого заключается в регистрации изменения резонансной частоты пьезоэлектрической кварцевой пластины с нанесенным на нее пористым слоем ZnO:Ga под воздействием УФ-излучения из-за десорбции газов с ультраразвитой поверхности оксидного слоя, в том числе энергонезависимого типа или при создании солнечнослепых детекторов УФ-излучения.

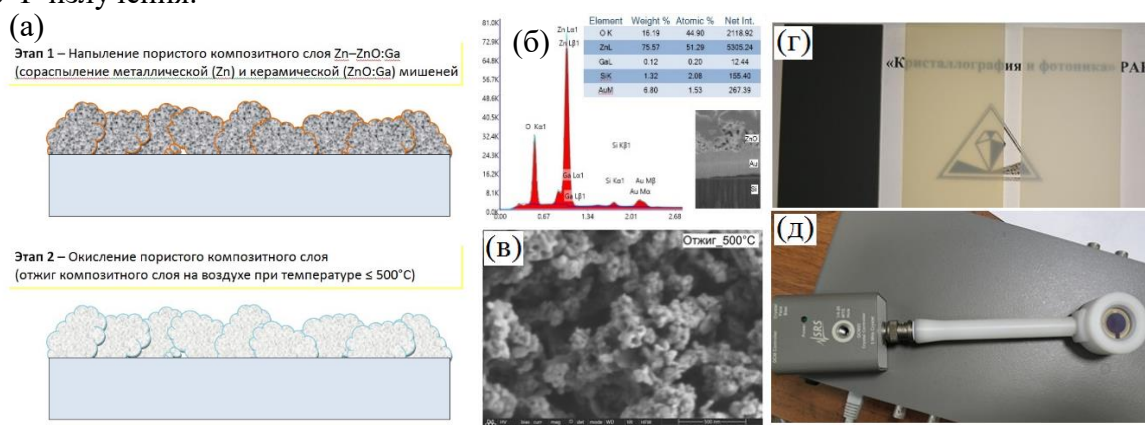


Рис. 1. Двухстадийная методика получения пористых слоев ZnO (а); Данные ЭДС (б) и SEM (в) пористого оксидного слоя, полученного при окислении композитного слоя Zn-ZnO:Ga при 500°C в течение 2-х часов (б); Внешний вид пористого слоя до и после окисления (г); Пластина с нанесенным пористым слоем ZnO:Ga, заправленная в держатель образца кварцевых микровесов QCM200 (д).

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Литература

1. Абдуев А.Х., Асваров А.Ш., Ахмедов А.К., Беляев В.В., Скворцов А.Ю., Пленцова Д.С. // Вестник МГОУ. Сер.: Физика-математика. – 2019. – №1. – с. 74-82.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТА ОДНООСНОГО СЖАТИЯ НА РАЗМЕРНОСТЬ И ТОПОЛОГИЮ СВЯЗЕЙ СЛОИСТОГО GaSe И ДРУГИХ МАТЕРИАЛОВ ГРУППЫ АПВВ

Степанов Р. С.¹, Герсга В. А.¹, Суслов А. В.¹, Колобов А. В.¹

¹РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия, stepanovroman@herzen.spb.ru

Создание, исследование и контроль параметров слоистых Ван-дер-Ваальсовых (ВдВ) материалов, то есть материалов, в которых ковалентно связанные монослои удерживаются вместе гораздо более слабыми силами ВдВ, находятся в центре внимания современной полупроводниковой науки и техники. Слабые ВдВ-взаимодействия, присутствующие в таких материалах, позволяют создавать сверхтонкие слои и гетероструктуры с атомарно резкими границами раздела вне зависимости от постоянных решетки [1], что обуславливает их относительную технологическую простоту изготовления. Такие материалы значительно расширяют спектр возможностей для проектирования и исследования устройств прозрачной и гибкой электроники. Потенциал манипулирования свойствами и методами получения таких материалов посредством понимания реконфигурации щели ВдВ представляется весьма многообещающим [2].

В нашем исследовании с использованием расчетов теории функционала плотности была обнаружена новая квазиодномерная (q1D) фаза в селениде индия (InSe) и родственных материалах класса АЗВ5 (GaSe, GaTe) при высоком давлении. Эта фаза характеризуется заметным изменением электронной плотности и электронной структуры. Неспособность закрыть щель ВдВ в этой фазе объясняется антисвязывающим характером взаимодействий Se-Se. Тщательный анализ связей в новой фазе на основе кристаллической орбитальной популяции Гамильтона (СОНР) предоставляет более широкое понимание топологии связей при переходе к q1D-структуре в продолжение наших предыдущих исследований осевого давления в GaSe [3].

Полученные результаты позволяют предположить, что вывод о структуре фазы высокого давления β -GaSe и других родственных материалах может нуждаться в пересмотре. По-видимому, все полиморфы как при гидростатическом, так и при осевом давлении претерпевают переход в квазикубическую (без связей) и хлорцезиевую фазы.

Мы полагаем, что обнаруженная в данной работе неспособность закрыть щели ВдВ в GaSe является общим результатом, который должен иметь место и в других халькогенидных материалах ВдВ, таких как дихалькогениды переходных металлов и материалы семейства Sb₂Te₃. Эти исследования в настоящее время продолжаются.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-19-00766).

Литература

1. Geim, A. K. & Grigorieva, I. V. Van der waals heterostructures. Nature 499, 419–425 (2013). URL <https://doi.org/10.1038/nature12385>.
2. Kolobov A. V. et al. Atomic reconfiguration of van der Waals gaps as the key to switching in GeTe/Sb₂Te₃ superlattices //ACS omega. – 2017. – Т. 2. – №. 9. – С. 6223-6232.
3. Stepanov R. et al. Uniaxial pressure-induced 2D-1D dimensionality change in GaSe and related materials //physica status solidi (RRL)–Rapid Research Letters.

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ НЕПЛАНАРНЫХ НАНОСТРУКТУР INGAN В ОБЛАСТИ НЕСМЕШИВАЕМОСТИ И ИХ СВОЙСТВА

Гридчин В.О.¹⁻³, Резник Р.Р.¹, Котляр К.П.¹⁻³, Драгунова А.С.², Кириленко Д.А.³,
Крыжановская Н.В.², Цырлин Г.Э.¹⁻³

¹СПбГУ, Санкт-Петербург, Российская Федерация,

²СПбАУ РАН им. Ж.И. Алфёрова, Санкт-Петербург, Российская Федерация,

³ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Российская Федерация,

E-mail: gridchinfo@gmail.com

В настоящее время бинарные и тройные соединения на основе InGaN представляют интерес для создания светоизлучающих устройств в спектральном диапазоне от ближнего УФ до ближнего ИК. Однако, основной проблемой получения InGaN видимого и ИК диапазонов является широкая область несмешиваемости соединений ($x_{In} \sim 0.2-0.8$) при типичных ростовых температурах [1]. В результате это приводит к неконтролируемым свойствам формируемых планарных слоёв InGaN с высоким содержанием In и низкой квантовой эффективности коммерческих светодиодов начиная от зеленого спектра и выше по длине волны излучения. Одним из способов преодоления указанных недостатков может являться синтез непланарных наноструктур, таких как нитевидные нанокристаллы (ННК), наноразмерные структуры с разветвленной морфологией и др. Однако, к настоящему моменту непланарные наноструктуры InGaN, формируемые с химическим составом в области несмешиваемости, в том числе, методом молекулярно-пучковой эпитаксии с плазменной активацией азота (МПЭ ПА), остаются практически неизученными.

Настоящая работа посвящена исследованию особенностей формирования непланарных наноструктур InGaN с высоким содержанием In и их свойств. Образцы выращивались на подложках Si(111) методом молекулярно-пучковой эпитаксии с плазменной активацией азота на установке Riber Compact 12. Было исследовано влияние ростовой температуры (от 600 до 670 °С) на физические свойства формируемых наноструктур. Установлено, что при пониженных ростовых температурах (~ 600 °С) формируются наноструктуры InGaN с разветвленной морфологией. Повышение температуры роста при прочих соответствующих параметрах вначале приводит к формированию нитевидных нанокристаллов, а затем к формированию сплошного слоя, что объясняется уменьшением x_{In} в образцах. Предложен механизм формирования таких структур. Выращенные образцы демонстрируют фотолюминесценцию в диапазоне от 380 до 650 нм в соответствии с x_{In} при комнатной температуре и накачке He-Cd лазером.

Таким образом, полученные результаты могут представлять интерес как для фундаментальных исследований механизмов роста наноструктур InGaN в области несмешиваемости, так и для прикладных исследований, в частности создания микро-светоизлучающих диодов на кремнии.

Ростовые эксперименты проведены при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-79-00012). Исследования свойств образцов проведены при финансовой поддержке Санкт-Петербургского государственного университета в рамках исследовательского гранта № 94031047.

Литература

1. Karpov S. Y. //MRS Internet Journal of Nitride Semiconductor Research. – 1998. – Т. 3. – № 1. – С. 16.

НАПРЯЖЕНИЯ НЕСООТВЕТСТВИЯ И УПРУГАЯ ЭНЕРГИЯ НАНОПРОВОЛОКИ ТИПА «ЯДРО-ОБОЛОЧКА» С ЯДРОМ В ФОРМЕ ПРАВИЛЬНОЙ ПРИЗМЫ

Красницкий С. А.¹, Смирнов А. М.¹, Гуткин М. Ю.¹⁻³

¹ *Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Санкт-Петербург, krasnitsky@inbox.ru*

² *Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург,*

³ *Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург*

Композитные нанопроволоки типа «ядро-оболочка» являются типичными представителями гетероструктур пониженной размерности и благодаря своим уникальным функциональным свойствам находят широкое применение при производстве современных оптоэлектронных устройств. Надежность этих устройств во многом определяется состоянием межфазной границы между ядром и оболочкой, включая ее форму, несоответствие кристаллических решеток и присутствие дефектов [1]. Как правило, межфазная граница в таких нанопроволоках имеет фасетированную форму многоугольных призм различных поперечных сечений: треугольного, прямоугольного, шестиугольного и др. В этом случае двугранные углы ядра выступают в роли концентраторов напряжений, инициирующих процессы релаксации напряжений несоответствий, а именно – зарождение и развитие дислокаций несоответствия [2]. Напряжения несоответствия, определенные с учетом реальной огранки межфазной границы, представляют прикладной интерес для построения теоретических моделей релаксации напряжений в таких нанопроволоках.

В данной работе нанопроволока типа «ядро-оболочка» рассматривается как упругоизотропное цилиндрическое тело, содержащее призматическое дилатационное включение. Напряжения несоответствия в такой нанопроволоке могут быть определены интегрированием упругих полей источников – прямолинейных дилатационных нитей [3]. В рамках такого подхода получены аналитические выражения для компонент тензора напряжений и энергии такой нанопроволоки. Показано, что в отличие от случая призматического включения в неограниченном теле [4] гидростатическая компонента тензора напряжений имеет неоднородное распределение – присутствие цилиндрической поверхности искажает изолинии напряжений в ядре и оболочке. Кроме того, продемонстрировано, что упругая энергия нанопроволоки с призматическим ядром меньше энергии нанопроволоки с цилиндрическим ядром того же размера. При увеличении числа граней призматического ядра энергия нанопроволоки стремится к энергии нанопроволоки с цилиндрическим ядром.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-19-00617.

Литература

1. Ding M., Guo, Z., Chen, X., et al. // *Nanomaterials*. – 2020. – Vol. 10. – No. 2. – Art. No. 362.
2. Kavanagh K. L. // *Semicond. Sci. Technol.* – 2010. – Vol. 25. – No. 2. – Art. No. 024006.
3. Колесникова А.Л., Сорока Р.М., Романов А.Е. // *Mater. Phys. Mech.* – 2013. – Т. 17. – № 1. – С. 71-91.
4. Мальшев К.Л., Гуткин М.Ю., Романов А.Е. и др. // *ФТТ*. – 1988. – Т. 30. – № 7. – С. 2040-2045.

ИНДУЦИРОВАННЫЙ ТРАНСПОРТ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В НЕСОПРЯЖЕННЫХ ПОЛИМЕРАХ

Лачинов А.Н.^{1,2}, Галиев А.Ф.^{1,2}, Карамов Д.Д.^{1,2}, Арутюнов Ю.К.³

¹Институт физики молекул и кристаллов РАН, Уфа, Россия, lachinov_a@mail.ru

²Башкирский государственный педагогический университет, Уфа, Россия

³Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики", Москва, Россия, arutyunov@hse.ru

Полимеры нашли широкое применение в различных электронных устройствах. На основе полимерных материалов создаются тонкопленочные полевые транзисторы, электролюминесцентные диоды и экраны, химические сенсоры, элементы энергонезависимой памяти, спинтроника и др. Развитие органической электроники стимулирует поиск новых органических материалов, способных превзойти обычные по электронным характеристикам, и новых технологических подходов для управления электропроводностью материалов. Несопряженные полимерные материалы хорошо известны. Они более технологичны по сравнению с сопряженными полимерами. Тонкие пленки некоторых несопряженных полимеров могут обладать высокой проводимостью, активируемой внешним воздействием (температура, давление, различные виды излучения, электрические и магнитные поля и др.). При этом электропроводность может быть сравнима с электропроводностью металлов. Природа такой проводимости до сих пор является предметом дискуссий.

В докладе представлены результаты исследований температурной зависимости электропроводности полимеров в структурах двух типов. Первая структура была нормальный металл/полимер/нормальный металл. В качестве металла использовался алюминий. Во второй структуре в качестве электродов были использованы сверхпроводящие металлы, в качестве которых были использованы Pb и Nb. В случае нормальных металлов наблюдается температурная зависимость металлического типа. Специфика органического материала проявляется в незначительном отклонении от линейности. Что можно объяснить вкладом межмолекулярных прыжков. При этом уровень проводимости практически совпадает с проводимостью использованного алюминия. При использовании в качестве электродов сверхпроводящих металлов наблюдаются переходы в состояние приборного нуля по сопротивлению при достижении температуры критической температуры сверхпроводящего перехода металлов. Можно предположить, что в полимерной пленке возникает наведенная сверхпроводимость. В докладе обсуждаются возможные объяснения подобного поведения полимерной проводящей пленки. В частности, обсуждаются подходы с точки зрения эффекта Джозефсона и с точки зрения эффекта близости. Сложность простого объяснения заключается в относительно большой толщине полимерной пленки до 400 нм.

Работа выполнялась при поддержке проекта «Зеркальные лаборатории» Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» и Башкирского государственного педагогического университета им. М. Акмуллы.

АБ-INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАЗИБИНАРНЫХ СПЛАВОВ: ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСТЕМ InSe-GaSe И InTe-GaTe

Марланд П. И.¹, Степанов Р. С.¹, Анисимова Н. И.¹, Колобов А. В.¹

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена», Санкт-петербург, Россия, mail@herzen.spb.ru

Двумерные (2D) полупроводники AIIIВVI, привлекают большое внимание в связи с перспективами их использования в различных приложениях микроэлектроники. Например, квазидвумерный полупроводник InSe особенно привлекателен благодаря своим сильно анизотропным свойствам и рекордно высокой подвижности носителей заряда. Модулируя количество слоев, ширина запрещенной зоны InSe может варьироваться от 1,4 до 2,6 эВ[1]. Кроме того, из-за существенного влияния Ван-дер-Ваальсового взаимодействия между слоями, возможно создание гетероструктур независимо от постоянных решетки [2].

Одним из возможных методов повышения функциональности материалов является создание квазибинарных сплавов. Такие материалы обычно демонстрируют линейные изменения параметров своей кристаллической структуры в соответствии с законом Вегарда [3], хотя возможно и более сложное поведение[4]. Наше исследование касается квазибинарных сплавов InSe-GaSe и InTe-GaTe, которые исследуются путем моделирования из первых принципов. Мы анализируем влияние композиционного и структурного беспорядка на электронные и оптические свойства, а также различия в свойствах в зависимости от взаимного расположения слоев InGaSe и при смешении двух фаз.

Отмечено уменьшение ширины запрещенной зоны при случайном распределении катионов индия и галлия и при распределении соответствующему конфигурации Se-In-Ga-Se - VdW - Se-In-Ga-Se. Для остальных конфигурациях происходит увеличение ширины запрещенной зоны. Обнаружено значительное влияние расстояния между слоями на ширину запрещенной зоны при сжатии по оси с. В то же время существенного влияния латерального смещения слоев на электронную структуру не обнаружено. В случае квазибинарных сплавов InTe-GaTe, при деформациях по оси с обнаружено сходство с поведением селенидных сплавов.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (грант № 22-19-00766)

Литература

1. Venanzi T. et al. Photoluminescence dynamics in few-layer InSe //Physical Review Materials. – 2020. – Т. 4. – №. 4. – С. 044001.
2. Kim S. J. et al. Materials for flexible, stretchable electronics: graphene and 2D materials //Annual Review of Materials Research. – 2015. – Т. 45. – С. 63-84.
3. Srour J. et al. Crystal structure and energy bands of (Ga/In) Se and Cu (In, Ga) Se₂ semiconductors in comparison //physica status solidi (b). – 2016. – Т. 253. – №. 8. – С. 1472-1475.
4. Bodlos R. et al. Ab initio investigation of the atomic volume, thermal expansion, and formation energy of WTi solid solutions //Physical Review Materials. – 2021. – Т. 5. – №. 4. – С. 043601.

ПОЛУЧЕНИЕ ЕДИНИЧНЫХ НАНОПРОВОЛОК И ИХ ИЗУЧЕНИЕ МЕТОДАМИ СЗМ

Бизяев Д. А.¹, Загорский Д. Л.², Долуденко И. М.², Хайретдинова Д. Р.², Ризванова А. А.², Муслимов А. Э.²

¹ Казанский физико-технический институт РАН, Казань, Россия,

²ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва E-mail: dzagorskiy@gmail.com

Большой интерес вызывают магнитные свойства одномерных наноструктур или нанопроволок (НП). Одним из способов получения подобных структур является матричный синтез. Сочетание малого размера и высокого аспектного отношения, а также возможность создания НП с чередующимися слоями, позволяет получить структуры со свойствами, значительно отличающимися от макроскопических аналогов того же состава. Например, образцов с высокой коэрцитивной силой или управляемым направлением оси лёгкого намагничивания. При этом важно исследование свойств единичных НП. Однако выделение единичных НП затруднено из-за их магнитного взаимодействия и агломерации.

В настоящей работе рассмотрены методики по предотвращению агрегатов НП. Методом матричного синтеза были получены НП с чередующимися слоями магнитного (никель) и немагнитного (медь) металлов. Далее было проведено выделение НП во взвесь. Для выделения отдельных частиц каплю с взвесью НП помещали на предметное стекло и прикладывали переменное по направлению магнитное поле [1]. При этом удавалось выделить отдельные НП Ni/Cu. Предварительная аттестация проводилась методом СЭМ. Последующее АСМ/МСМ исследование, начатое в [2], было проведено на АСМ Solver P-47 с использованием магнитного кантилевера. Пример полученных изображений приведен на Рис.1.

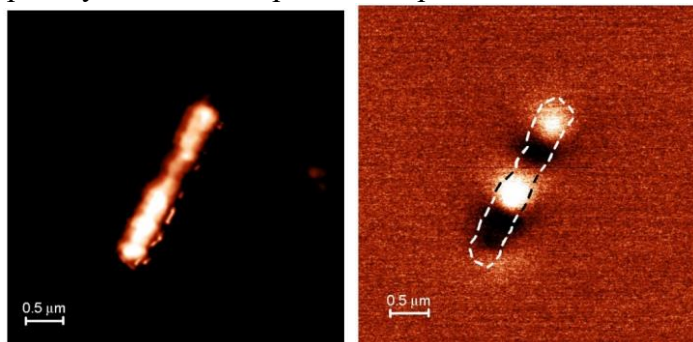


Рис.1. АСМ (слева) и МСМ изображения (справа) фрагмента единичной НП Ni/Cu

Для изучения перемагничивания при приложении внешнего магнитного поля была получена серия МСМ изображений при последовательно увеличивающемся внешнем поле. По характеру перемангничивания была определена коэрцитивная сила для пары НП: $5 \pm 0,5$ мТл. Эта величина меньше, чем для массива НП в матрице, где КС возрастает из-за диполь-дипольного взаимодействия НП. Проведенные исследования позволили охарактеризовать отдельные магнитные наночастицы и степень их влияния на магнитные свойства массивов гетероструктурных НП.

Благодарности. Работа проведена при поддержке Гранта РФФ 22-22-00983

Литература

1. Долуденко И.М., Хайретдинова Д. Р., Загорский Д.Л.// Известия РАН. Серия физическая – 2023. – Т.87, №3. С. – 137-149.
2. Бизяев Д.А., Хайретдинова Д.Р., Загорский Д.Л.// Физика металлов и металловедение – 2023. (подано в печать)

ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ КОМПОЗИТА Nb₅Si₃/NBC/NBSi₂, ПОЛУЧЕННОГО МЕТОДОМ СВС

Никонова Р.М., Ларионова Н.С., Ладьянов В.И.

*Научный центр металлургической физики УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия,
rozam@udman.ru*

Система Nb-Si представляет интерес с точки зрения получения высокотемпературных материалов нового поколения, способных заменить жаропрочные никелевые сплавы [1]. Эвтектические сплавы на основе Nb-Si с композиционным упрочнением силицидами относятся к in-situ композитам Nb/Nb_xSi_y, структура которых определяется морфологическим распределением твердого раствора Nbss и силицидов Nb_xSi_y. В тройной системе Nb-Si-C из-за высокого сродства Nb и C может меняться модификация силицидов α-, β-, γ- Nb₅Si₃. При этом детальные исследования формирования структуры в системе Nb-Si-C отсутствуют. Кроме того, в ряде расчетных работ для тройной системы Nb-Si-C показана возможность существования МАХ-фаз различной стехиометрии - Nb₂SiC Nb₃SiC₂ и Nb₄SiC₃ [2]. Однако экспериментальные данные о получении МАХ-фаз из семейства Nb-Si-C отсутствуют.

Температура плавления ниобия ~2741 К, его силицидов Nb₄Si, Nb₅Si₃ и NbSi₂ - 22873, 2753 и 2423 К соответственно. Кроме того, химическая активность расплавов силицидов ниобия обуславливает проблему, связанную с их окислением. Поэтому технология их получения традиционными литейными способами сопровождается высокими энергозатратами. Существенно более экономический способ получения композиционных материалов на основе тугоплавкого ниобия является саморастространяющийся высокотемпературный синтез (СВС), а именно - метод СВС-металлургии, основанный на восстановлении оксидов металлов в процессе горения порошковых смесей. Температура горения в этом случае превышает температуру плавления компонентов и может достигать 4500 К.

В настоящей работе методом СВС-металлургии (алюмотермии) получен композиционный материал на основе системы Nb-Si-C M₂АХ-стехиометрии. Синтез осуществляли в СВС-реакторе РВС-10 объемом 10 л, изготовленном в НЦ МФМ УдмФИЦ УрО РАН, в среде аргона (РАг = 80 атм). Реакцию горения инициировали нагревом вольфрамовой спирали. Методом рентгеновской дифракции показано, что в образце формируются карбид NbC и силициды γ-Nb₅Si₃ и NbSi₂. Методом растровой электронной микроскопии выполнен детальный анализ морфологического распределения составляющих фаз.

Литература

1. Bewlay B.P., Jackson M.R., Zhao J.-C., Subramanian P.R. A review of very-high-temperature Nb-Silicide-based composites // Metallurgical and materials transactions A. 2003. V. 34A. P. 2043-2052.
2. Feng Sh., Guo F., F Miao., Wang Z., Yuan Ch., Xuerui Ch., Yang K. Nb-based double transition metal silicides MAX-phase: a first-principle study // Chemical Physics. 2021. V. 551. 111321.

СПЕРКТОСКОПИЯ МНОГОКРАТНЫХ АНДРЕЕВСКИХ ОТРАЖЕНИЙ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО СЕЛЕНИДА (K,Na)Fe₂Se₂

Ильина А.Д.^{1,2}, Кузьмичев С.А.^{3,1}, Михайлов В.М.^{1,2}, Никитченков И.А.³,
Морозов И.В.³, Болталин А.И.³, Шилов А.И.¹, Кузьмичева Т.Е.¹

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия, office@lebedev.ru

²Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия, info@mipt.ru

³МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия, info@rector.msu.ru

Соединение (K,Na)Fe₂Se₂ переходит в сверхпроводящее (СП) состояние при критической температуре $T_c = 31$ К. Слоистые монокристаллы (K,Na)Fe₂Se₂ обладают естественным фазовым расслоением: при $T < T_c$ в них сосуществуют две фазы (СП и диэлектрическая); объёмная доля СП фазы в среднем составляет 10-15% [1]. На поверхности Ферми присутствуют электронные цилиндры вблизи M-точки зоны Бриллюэна [1].

В данной работе исследованы вольтамперные характеристики (ВАХ) и спектры дифференциальной проводимости (ДП) планарных туннельных контактов типа ScS (*S* – СП, *c* – барьер), полученных методикой “break-junction” [2]. На рассмотренных спектрах ДП ниже T_c наблюдался резкий пик проводимости при нулевом напряжении смещения, что вместе с характерным избыточным током I_{exc} на ВАХ и отсутствию сверхтоковой ветви при $eV = 0$ свидетельствуют о высокой прозрачности получаемого туннельного барьера и реализации эффекта некогерентных многократных андреевских отражений (МАО). Согласно [3,4], температурные зависимости особенностей, вызванных МАО: $I_{exc}(T) \propto \Delta(T)$, $G_{zbc}(T) \propto \tanh[\Delta(T)/(2k_B T)]$. Кроме того, в соответствии с [3] на спектрах ДП наблюдались субгармонические структуры (СГС), состоящие из минимумов при смещениях $|eV(T)| = 2\Delta(T)/n$ ($n = 1, 2, \dots$).

Положения минимумов СГС на спектрах ДП напрямую определяют величину СП параметра порядка $\Delta(0) = 5.3 \pm 0.3$ мэВ. Соответствующее характеристическое отношение $2\Delta(0)/k_B T_c = 3.88 > 3.53$, превышающее БКШ-предел слабой связи, говорит о сильном взаимодействии в электронных зонах. Экспериментальная зависимость $I_{exc}(T)$ может быть описана однозонной БКШ-образной моделью; в то же время $G_{zbc}(T)$ проходит немного ниже соответствующей теоретической кривой. Вероятные причины выбывания квазичастиц из процесса МАО при $eV \rightarrow 0$ – неупругое рассеяние или пониженная плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми.

Помимо щелевых минимумов СГС, ниже T_c на спектрах ДП мы наблюдали тонкую структуру при $|eV| = [2\Delta + \varepsilon]/n$, связанную, предположительно, с испусканием бозона с энергией $\varepsilon(0) \approx 6.4$ мэВ в процессе МАО. С увеличением температуры энергия бозона $\varepsilon(T)$ слабо убывала, не повторяя зависимость $\Delta(T)$, однако схоже с поведением энергии спин-резонансного пика в железосодержащих СП [5]. Определенные нами энергетические параметры $\Delta(0)$ и $\varepsilon(0)$ воспроизводятся и практически не зависят от геометрических параметров ScS-контакта.

Литература

1. A. Krzton-Maziopa // Front. Chem. 2021. V. 9. P. 640361.
2. С.А. Кузьмичев, Т.Е. Кузьмичева // Физ. Низк. Темп. 2016. Т. 42. С. 1284.
3. R. Kummel, U. Gunsenheimer, and R. Nicolisky // Phys. Rev. B 1990. V. 42. P. 3992.
4. U. Gunsenheimer, A.D. Zaikin // Phys. Rev. B 1994. V. 50. P. 6317.
5. М.М. Korshunov, V.A. Shestakov, Yu.N. Togushova // Phys. Rev. B 2016. V. 94. P. 094517.

РЕЛАКСАЦИЯ НАПРЯЖЕНИЙ НЕСООТВЕТСТВИЯ НА ГРАНИЦАХ ТРУБЧАТОГО ВКЛЮЧЕНИЯ КОНЕЧНОЙ ДЛИНЫ ЗА СЧЕТ ОБРАЗОВАНИЯ ПРИЗМАТИЧЕСКИХ ДИСЛОКАЦИОННЫХ ПЕТЕЛЬ

Гуткин М. Ю.¹⁻³, Мордасова Е. А.¹, Колесникова А. Л.^{1,2}, Романов А. Е.²

¹*Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия,*

²*Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия*

³*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия, m.y.gutkin@gmail.com*

Трубчатые включения разных размеров, от наноскопических, как в случае кольцевых квантовых точек в полупроводниковых наноструктурах [1], до микроскопических, как, например, в случае трубчатых симплектических включений в оливине [2], вызывают большой интерес в различных областях материаловедения. Образование таких включений приводит к появлению упругих полей, вызванных несоответствием кристаллических решеток и коэффициентов теплового расширения включений и матрицы. Наличие этих полей и процессы их релаксации, которые сопровождаются формированием дефектов несоответствия, существенно сказываются на свойствах подобных композитных систем, что вызывает большой интерес к изучению напряжений несоответствия и механизмов их релаксации.

В настоящей работе впервые построена упругая модель трубчатого дилатационного включения конечной длины в бесконечной упруго-однородной изотропной среде. Показано, что внутри включения, в полости, заполненной матрицей, уровень нормальных радиальных и окружных напряжений намного (в исследованном случае – на порядок) ниже, чем в стенке включения. При увеличении радиуса внутренней полости окружные напряжения в стенке возрастают, а снаружи от нее – убывают.

Предложен механизм релаксации этих напряжений за счет образования в разных местах прямоугольного сечения включения малых прямоугольных призматических дислокационных петель (ПДП; ранее этот механизм исследовался применительно к наночастицам [3] и нанопроволокам [4] типа «ядро-оболочка»). Получены и исследованы изменения полной энергии системы, вызванные образованием ПДП разной формы в разных точках прямоугольного сечения включения.

Показано, что 1) наиболее предпочтительным местом образования ПДП является область в середине сечения стенки включения на ее внутренней границе, 2) наиболее предпочтительны ПДП, вытянутые вдоль этой границы, 3) критическое несоответствие, при котором образование этих ПДП становится энергетически выгодным, уменьшается с увеличением внешнего радиуса трубчатого включения и отношения его внутреннего и внешнего радиусов, и с уменьшением длины включения. Таким образом, включения в виде плоских колец относительно больших радиусов с более тонкими стенками наименее устойчивы к рассмотренному способу релаксации напряжений несоответствия.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-19-00617.

Литература

1. Baghdasaryan D.A., et al. // J. Nanophoton. – 2017. – Vol. 11. – No. 4. – Art. No. 046004.
2. Stevens M.R., et al. // Meteor. Planet. Sci. – 2010. – Vol. 45. – No. 5. – P. 899-910.
3. Gutkin M.Yu., Smirnov A.M. // Acta Mater. – 2015. – Vol. 88. – P. 91-101.
4. Krasnitckii S.A., Smirnov A.M., Gutkin M.Yu. // J. Mater. Sci. – 2020. – Vol. 55. – P. 9198-9210.

ВИХРЕВАЯ ДИНАМИКА В ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНКАХ TiN**Баева Э. М.^{1,2*}, Корчажинская С. А.², Колбатова А. И.^{1,2}, Гольцман Г. Н.^{1,2}**¹*Московский педагогический государственный университет, Москва, Россия*²*Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”,**Москва, Россия,***baeva.elm@gmail.com*

Интерес к однофотонным сверхпроводящим детекторам на основе микрополосок (SMSPD), прежде всего, обусловлен их потенциальным применением в медицинской визуализации и томографии, в космической связи, а также фотонов темной материи [1]. Для быстрой характеристики материала, потенциально пригодного для SMSPD, уже зарекомендовал себя подход Ларкина-Овчинникова [2], связывающий время релаксации энергии (τ_E) со скоростью вихрей через функцию распределения квазичастиц в ядре вихря [3-8]. Благодаря такой связи, измеряя вольт-амперные характеристики в магнитном поле, можно получить значение τ_E , и тем самым оценить эволюцию горячего пятна, возникающего при поглощении фотона в SMSPD. Однако, несмотря на легкое и быстрое определение τ_E , до сих пор отсутствует объяснение несоответствия между временами τ_E , полученными из скорости вихрей и другими методами (например, из фотоотклика, магнетосопротивления). Проблемы могут скрываться в учете пиннинга вихрей.

В связи с этим, мы проверяем данный подход на эпитаксиальных пленках нитрида титана (TiN), в которых потенциально мало дефектов, которые могли бы служить центрами пиннинга для вихрей. В образцах различной ширины (W), изготовленных из 9 нм TiN пленки, мы измеряем вольт-амперные характеристики в магнитном поле ниже критической температуры. В узком образце ($W=0.5$ мкм) плотность критического тока значительно выше по сравнению с широкими образцами, что свидетельствует о наличии высокого краевого барьера для входа вихрей. Также мы видим, что из данных для узкого образца невозможно получить информацию о скорости вихревого потока. В образце средней ширины ($W=10$ мкм) извлеченная скорость вихревого потока искажена в области низких магнитных полей из-за краевого барьера, в отличие от самого широкого образца ($W=500$ мкм), несмотря на то, что ширина последнего превышает Пирловскую длину. Таким образом, мы показываем важность влияния краевого пиннинга на получение неупругого времени при описании вольт-амперных характеристик теорией Ларкина-Овчинникова.

Благодарности

Авторы благодарят группу проф. В. Шалаева (Purdue University) за предоставление TiN пленок. Данная работа поддержана грантом РФФ № 21-72-10117.

Литература

1. S. Steinhauer, S. Gyger, and V. Zwiller // *Appl. Phys. Lett.* – 2021. – № 118. С. – 100501.
2. A. I. Larkin, Yu. N. Ovchinnikov // *J. Exp. Theor. Phys.* . – 1975. – № 41. С. – 960.
3. S. Lin, et al. // *Phys. Rev. B* – 2013. – № 87. С. – 184507.
4. Z. Liu et al. // *Supercond. Sci. Technol.* – 2021. – № 34. С. – 125014.
5. J. A. Hofer and N. Haberkorn // *Thin Solid Films* – 2021. – № 730. С. – 138690.
6. M. Caputo, C. Cirillo, C. Attanasio // *Appl. Phys. Lett.* – 2017. – № 111. С. – 192601.
7. C. Cirillo et al. // *Phys. Rev. Mater.* – 2021. – № 5. С. – 085004.
8. V.M. Bevez et al. // *arXiv:2302.05100* – 2023.

INFLUENCE OF THE FORMATION CONDITION ON THE STRUCTURE OF LANGMUIR-SCHAEFER FILMS OF μ -CARBIDODIMERIC IRON OCTAPROPYLPORPHYRAZINATE

L.A. Maiorova^{1,2}, V.V. Volkov³, T.V. Basova⁴, L.G. Yanusova³, S.B. Astaf'ev³,
A.N. Gromov², O.I. Koifman^{1,5}, D.V. Tyurin¹

¹) *Institute of Macroheterocyclic Compounds, Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Russia, maiorova.larissa@gmail.com*

²) *Federal Research Centre "Computer Science and Control" of RAS, Moscow, Russia*

³) *FSRC «Crystallography and Photonics» RAS, Moscow, Russia*

⁴) *Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry, Siberian Branch of RAS, Novosibirsk, Russia*

⁵) *Institute of Solution Chemistry, RAS, Ivanovo, Russia*

μ -X-dimer complexes of iron are effective catalysts for the oxidation of organic compounds, including methane and benzene, as well as oxygen donors. The presence of such compounds in the active centers of some oxidative enzymes (cytochrome P 450, catalase, peroxidase, etc.) contributed to the rapid growth in the number of studies aimed at such biomimetics. Information about the structure of films formed by the Langmuir-Schaefer (LS) method, which, as we have established, are effective heterogeneous catalysts, is currently absent.

In this work we report formation of thin Langmuir-Schaefer films of μ -carbido-dimeric iron octapropylporphyrinate (μ -(OPrPzFe)₂C) and study of the influence of film formation conditions on their structure. Two types of LS films were obtained by transferring onto silicon wafers formed at the air-water interface at low (film 1) and high (film 2) surface pressures (3 and 21 mN/m, respectively). The method of quantitative analysis of compression isotherms [1] showed that in the first case a monolayer, and in the second case a tetralayer of μ -(OPrPzFe)₂C was formed. The films were studied by X-ray diffraction (Figure 1 top and bottom lines, respectively). Position of the peaks on the

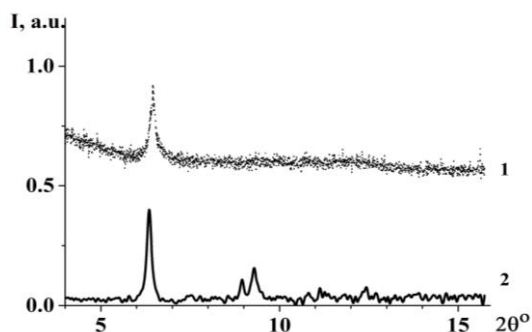


Figure 1. X-ray diffraction patterns of LS films of μ -(OPrPzFe)₂C.

diffraction pattern of the first film: $2\theta = 6.35$ deg., that corresponds to the layer structure with molecular tilt angle 84 degrees ($d=14$ Å) and of the second film: $2\theta = 6.35, 8.95$ and 9.29 deg., that corresponds to $d=13.99, 9.78, 9.51$ Å. Thus, under the conditions described above, on the water surface and in the LS film polycrystalline structure of μ -(OPrPzFe)₂C is formed [2].

Acknowledgements. *The work was supported by the grant of the RSF (N 20-12-00175-p), ISUCT (in the part of research); by the Ministry of Science and Higher Education (ISUCT, FZZW-2023-0009 in part of compound synthesis) and within the State assignment for FSRC «Crystallography and Photonics» RAS (in the part of molecular modelling).*

References

1. Maiorova L. et al. *BioNanoScience* 2018, 8, 81; Kharitonova N. *JPP* 2018, 22, 509; Petrova M. *Macroheterocycles* 2014, 7, 267; Erokhin V. et al. *Appl Surf Science* 2005, 245, 369; Maiorova L. *Biochem.* 2011, 8, 656; Maiorova L. et al. *Prot Met.* 2015, 51, 85.
2. Cédric Colombar et al. *Dalton Trans.* 2015, 44, 2240.

SPECTRAL PROPERTIES OF THIN FILMS OF PORPHYRINPOLYMER ZnTPP-P4VP

**Petrova M.V.¹, Maiorova L.A.^{1,2}, Kozlov A.S.³, Benditkis A.S.³, Krasnovsky A.A.³,
Ageeva T.A.¹, Koifman O.I.^{1,4}**

¹⁾ *Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Russia, petmaria04@yandex.ru*

²⁾ *Federal Research Centre "Informatics and Control" RAS, Moscow Russia*

³⁾ *Federal Research Centre "Fundamentals of Biotechnology" RAS, Moscow, Russia*

⁴⁾ *Institute of Solution Chemistry RAS, Ivanovo, Russia*

Functional polymers with side substituents are able to enter into coordination interactions with metalloporphyrins [1]. Previously, the process of coordination immobilization of zinc meso-tetraphenylporphyrinate (ZnTPP) with poly-4-vinylpyridine (P4VP) was studied in solutions. The purpose of this work was to study the spectral properties of thin films of the porphyrinpolymer ZnTPP-P4VP. Films for the research were prepared by two methods: (a) by drop coating technique using a solution of the porphyrinpolymer (Fig. 1a) mixed with an inactive polymer – polystyrene, in a molar ratio of 1: 1 and (b) by the Langmuir-Schaefer (LS) method [2] on quartz plates. The absorption and fluorescence spectra of the film are shown in Figure 1.

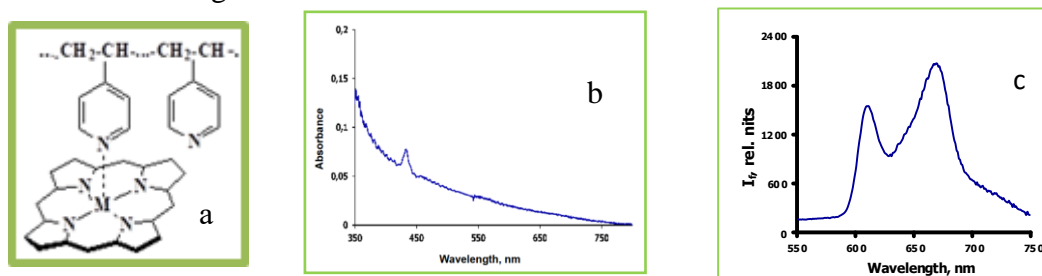


Fig. 1. Scheme of the MP-P4VP porphyrinpolymer (a), where MP is a metalloporphyrin, is shown without side substituents. Absorption (b) and fluorescence (c) spectra of ZnTPP in ZnTPP-P4VP/Pst film, 1:1. The absorption maximum is 433 nm, the fluorescence maxima are 610 and 670 nm.

It was shown that the fluorescence quantum yield of ZnTPP, which was estimated by comparison with the free-base tetraphenylporphyrin standard, in a solution of the porphyrin polymer in chloroform is the same as in the film obtained by applying the solution to the substrate – 0.04. However, according to our estimate, the fluorescence quantum yield of free ZnTPP in chloroform is almost twice that of a ZnTPP solution in a complex with a polymer. The fluorescence quantum yield of a thin LS film corresponds approximately to 0.007, i.e. fluorescence is very weak in this case. Further investigation is required.

Acknowledgements

This work was supported by a grant from the Russian Science Foundation (No. 20-12-00175-p), ISUCT (in the part of research), the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (FZZW-2023-0009 in the part of the synthesis of the compound) and State Assignment of the FRC for Biotechnology (modernization of the spectrophotometer to work with films).

References

1. Koifman OI, Ageeva TA. Porphyrinpolymers. Synthesis, properties, application M:Lenand 2019.
2. Petrova M. *Macroheterocycles* 2014, 7, 267; Maiorova L. et al. *BioNanoScience* 2018, 8, 81; Kharitonova N. *JPP* 2018, 22, 509; Erokhin V. et al. *Appl Surf Science* 2005, 245, 369; Maiorova L. *Biochem.* 2011, 8, 656; Maiorova L. et al. *Prot Met.* 2015, 51, 85.

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ОСТРОВКОВЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ

Симаков И.Г.

Институт физического материаловедения СО РАН, г. Улан-Удэ, Россия,

E-mail: baz_say@mail.ru

Значительный физический интерес представляет изучение электрон-фононного взаимодействия в планарных системах наноразмерных металлических частиц – островковых металлических пленках, которые успешно применяются в качестве холодных катодов, датчиков физических величин и элементов микроэлектроники. Несмотря на металлическую природу пленки электрические свойства этих низкоразмерных систем по своему характеру ближе к свойствам полупроводников. По мере роста и морфологической эволюции островковых металлических пленок их проводимость изменяется на порядки. Показано, что размерные особенности электрон-фононного взаимодействия в металлических наночастицах островковой пленки существенно влияют на её проводимость.

Основной механизм электронно-решеточного энергообмена, действующий в объемных металлах, в малых металлических частицах подавлен. Показано, что движение быстрых электронов не сопровождается потерей энергии, связанной с черенковской генерацией акустических колебаний решетки (фононов), хотя последний механизм диссипации энергии является доминирующим в объемных металлах. Быстрые электроны теряют свою энергию преимущественно в поверхностных столкновениях. Причиной обмена энергией является взаимодействие электрона с тепловыми колебаниями поверхности. Это способствует разогреву электронного газа.

Исследовано взаимодействие поверхностных акустических волн (ПАВ) (потока когерентных фононов) с электронами проводимости планарной системы наноразмерных металлических частиц в процессе напыления тонких пленок благородных металлов на поверхность *YZ*-среза пьезоэлектрического кристалла ниобата лития. Экспериментально получено, что затухание ПАВ в зависимости от сопротивления напыляемых металлических пленок имеет характерный максимум, а скорость ПАВ изменяется от скорости на свободной поверхности подложки до скорости на металлизированной поверхности. Из анализа ПЭМ-снимков островковой металлической пленки на разных стадиях её формирования следует, что максимальное затухание имеет место для пленки с характерными размерами металлических частиц (50 ÷ 100) нм. Релаксационный характер изменения скорости и затухания ПАВ объяснен акустоэлектронным взаимодействием.

Для островковой металлической пленки, сформированной на поверхности пьезоэлектрической подложки, получены приближенные аналитические выражения с использованием метода электромагнитного импеданса: уравнение, описывающее дисперсию скорости ПАВ в рассматриваемой слоистой системе; уравнение, позволяющее оценивать поглощение ПАВ в результате акустоэлектронного взаимодействия с носителями заряда в пленке. Дискретность структуры пленки позволяет утверждать, что диффузионные эффекты в ней не существенны. Обнаружено, что взаимодействие ПАВ с носителями заряда в островковых пленках носит релаксационный характер. Частота релаксации зависит от поверхностного сопротивления пленок. Выявлено, что результаты измерения поверхностной проводимости зависят от условий формирования островковой пленки, ее структурной однородности и метода измерения поверхностного сопротивления.

THERMAL STABILITY OF CONCENTRATED SOLUTIONS OF HYDROGEN IN AMORPHOUS SILICATES WITH DIFFERENT SPECIFIC SURFACE AREA AND CATION CONTENT.

Efimchenko V.S.¹, Meletov K.P.¹, Korotkova M.A.¹, Masalov V.M.¹, Sukhinina N.S.¹, Emel'chenko G.A.¹, Buchner S.²

¹ *Institute of Solid State Physics of the Russian Academy of Sciences, Akademika Osipyana Street 2, Chernogolovka, Moscow Region 142432, Russia, efimchen@issp.ac.ru*

² *Institute of Physics, Federal University of Rio Grande do Sul (UFRGS) Av. Bento Gonçalves, 9500 Porto Alegre 9150-970, Brazil, silvio.buchner@ufrgs.br*

To study the effect of specific surface area and lithium cations on the stability of solid solutions of molecular hydrogen, we investigated the thermal stability of concentrated solid solutions of molecular hydrogen in the bulk silica glass, SiO₂ opal matrices OM-1600 and bulk lithium silicate glass Li₂O•6SiO₂. All samples were hydrogenated at pressures of 7.5 and 6.6 GPa and temperatures of 250-280 °C. According to the Raman spectroscopy and hot desorption data, the hydrogenated amorphous silicates contained from 0.39 (Li₂O•6SiO₂) to 0.8 (opal matrices) moles of hydrogen in the molecular form. The Raman spectra of hydrogen-saturated opal matrices measured at a temperature of 80 K and ambient pressure show that hydrogen molecules are adsorbed in two different ways, directly into silica spheres and mesopores between them.

The kinetics of hydrogen desorption in the near-surface layers of hydrogenated silica glass, opal matrices and lithium silicate glass were studied by Raman spectroscopy at T = -196-65 °C. The data at different temperatures for all samples are well described by the Arrhenius formula showing the activation character of desorption with the activation energy E_A = (0.16 ± 0.01) eV and time constant A = (0.027 ± 0.003) for the SiO₂(glass)-0.6H₂; E_A = 0.162 ± 0.013 eV and time constant A = (0.018 ± 0.005) sec for opal matrices 0.8H₂/OM-1600. The activation energy of hydrogen desorption in the near-surface layer of hydrogenated Li₂O•6SiO₂ glass obtained by Raman spectroscopy of (0.419 ± 0.019) for 0.39H₂ content is higher than both of hydrogenated pure silica glass and opal matrices. Taking into account such a high value of the activation energy of the decomposition of the solution, which is not characteristic of the van der Waals interaction, we assume that its high thermal stability is due to the emergence of the "Kubas" interaction between hydrogen molecules and the silicate network initiated by the lithium cations. This interaction leads to an increase in the time constant τ of the decomposition of a hydrogen solid solution in the lithium silicate glass at room temperature by several thousand times to τ = 3220 sec as compared to the decomposition of a hydrogen solution in pure silica glass (τ = 3 sec). The results obtained by hot desorption during isothermal annealing in a pre-evacuated vessel showed that the activation energy of hydrogen diffusion that might be higher than 0.51 eV also had a great impact on the stability of a hydrogen solution in the bulk lithium silicate glass, which additionally increased the decay time constant to τ ≈ 16000 sec at room temperature. The study was supported by the Russian Science Foundation grant No. 23-23-00426, <https://rscf.ru/en/project/23-23-00426/>

ЭЛЕКТРОННО-ЛУЧЕВАЯ ГЕНЕРАЦИЯ ЛЮМИНЕСЦИРУЮЩИХ ДЕФЕКТОВ В ГЕКСАГОНАЛЬНОМ НИТРИДЕ БОРА

Гогина О. А.^{1,*}, Петров Ю. В.¹, Вывенко О. Ф.¹, Kovalchuk S.², Bolotin K.²

¹*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия.*

²*Free University of Berlin, Berlin, Germany.*

*o_gogina@mail.ru

Источники одиночных фотонов (ИОФ) в настоящее время представляют большой интерес в области квантовых вычислений и квантовой криптографии. В гексагональном нитриде бора возможно создание ИОФ, которые будут работать при комнатной температуре, а его характерные полосы люминесценции наблюдаются в ультрафиолетовом и видимом диапазоне длин волн, что является большим преимуществом исследуемого материала. Управление люминесцентными свойствами h-BN возможно посредством воздействия на образец электронным пучком. В нашей работе исследуются две основные полосы люминесценции с максимумами при энергии фотонов 5.8 эВ, 3.9 эВ.

Исследование проводилось методом катодолюминесценции в диапазоне длин волн 200–700 нм на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) Zeiss SUPRA 40VP с системой регистрации Gatan Mono CL3+ в режиме непрерывного сканирования электронным пучком с энергией 5 кэВ и током 3 нА при плотности потока электронов порядка 10^{16} см⁻²с⁻¹. Было получено несколько серий зависимостей интенсивности полос 5.8 эВ и 3.9 эВ от времени воздействия.

Интенсивность полосы 5,8 эВ в процессе сканирования уменьшается, достигая насыщения со значениями интенсивности в 2 раза меньше начальных за время порядка 200 секунд. Интенсивность полосы 3,9 эВ растет, и после 3000 секунд воздействия электронами стремиться выйти на насыщение. Также замечено, что скорость роста увеличивается при увеличении плотности потока электронов.

Полосу 3,9 эВ в литературе часто связывают с углеродными примесями [1-2], поэтому рост её интенсивности вероятно обусловлен образованием дополнительных дефектов в результате осаждения углеводородов при сканировании электронным пучком. Также в процессе такого облучения образуются новые каналы рекомбинации, не связанные с новыми дефектами, из-за чего интенсивность зона-зонной люминесценции полосы 5,8 эВ уменьшается.

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 23-22-00067, <https://rscf.ru/project/23-22-00067/>. Экспериментальные результаты получены с использованием оборудования Междисциплинарного ресурсного центра по направлению "Нанотехнологии" Научного парка СПбГУ.

Литература

1. Pelini T., Elias C., Page R. et al. // *Physical Review Materials*. – 2019. – Т. 3. – № 9. – С. 094001.
2. Vokhmintsev A., Weinstein I. and Zamyatin D. // *Journal of Luminescence*. – 2019. – Т. 208. – С. 363-370.

ИССЛЕДОВАНИЕ ИНТЕРКАЛЯЦИИ ЗОЛОТА ПОД НУЛЕВОЙ СЛОЙ УГЛЕРОДА НА ПОДЛОЖКЕ SiC

Гогина А. А.¹, Рыбкина А. А.¹ и Рыбкин А. Г.¹

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, 198504 Санкт-Петербург, Россия, alevtina_gogina@mail.ru

Современной задачей для развития электроники и спинтроники является синтез эпитаксиальных слоистых наноструктур, которые могут быть использованы в устройствах хранения данных и квантовых вычислений. Например, хорошо упорядоченные системы на основе графена, синтезированного на полупроводниковых или изолирующих подложках, являются наиболее перспективными вариантами реализации квантовых эффектов. Многообещающим подходом синтеза таких систем является интеркаляция атомов металлов под нулевой слой графена (ZLG) на подложке SiC, при котором также модифицируется электронная структура графена [1, 2, 3]. Взаимодействие графена с Au приводит к возникновению сильного спин-орбитального взаимодействия и большого спинового расщепления Рашбы в электронной структуре графена [4, 5]. Однако, силицидобразование, препятствующее формированию тонких эпитаксиальных металлических слоев под графеном, является основной проблемой интеркаляции металлов под ZLG. Существует ряд статей [6, 7, 8], где авторы приводят результаты по синтезу и исследованию электронной структуры после интеркаляции Au под ZLG. Но в то же время, в данных работах не проводится количественный анализ интеркаляции золота, и неизвестно насколько однородно по образцу формируется графен, что важно для реализации p-n перехода.

В данной работе проводится исследование процесса интеркаляции атомов Au под ZLG по всей поверхности образца. С использованием методов фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением и метода теории функционала плотности мы представляем количественное исследование условий интеркаляции золота под ZLG с реконструкцией $(6\sqrt{3}\times 6\sqrt{3})R30^\circ$, а также показано отсутствие таковой для $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$.

Финансирование. Работа выполнена за счет гранта РФФ № 23-22-00112, <https://rscf.ru/project/23-22-00112/>.

Литература

1. Rybkina A. A., Filnov S. O., Tarasov A. V. et al. // *Phys. Rev. B.* – 2021. – Т. 104 – № 15. – С. 155423.
2. Фильнов С. О., Рыбкина А. А., Тарасов А. В. et al // *ЖЭТФ.* – 2022. – Т. 161. – №. 2. – С. 227-237.
3. Фильнов С. О., Естюнин Д. А., Климовских И. И. et al // *Письма в ЖЭТФ.* – 2023. – Т. 117. – №. 5. – С. 369-376.
4. Shikin A. M., Rybkin A. G., Marchenko D et al // *New J. Phys.* – 2013. – Т. 15. – №. 1. – С. 013016.
5. Marchenko, D., Varykhalov, A., Scholz, M. R. et al // *Nature comm.* – 2012. – Т. 3. – №. 1. – С. 1232.
6. Forti S., Link S., Stöhr A. et al // *Nature comm.* – 2020. – Т. 11. – №. 1. – С. 2236.
7. Gierz I., Suzuki T., Weitz R. T. et al // *Phys. Rev. B.* – 2010. – Т. 81. – №. 23. – С. 235408.
8. Sohn Y., Shin W. J., Ryu S. H. et al // *Journal of the Korean Physical Society.* – 2021. – Т. 78. – С. 40-44.

НОВЫЕ ПОЛИМОРФНЫЕ РАЗНОВИДНОСТИ НИТРИДА БОРА С АЛМАЗОПОДОБНЫМИ ФАЗАМИ ТА-ТИПА

Ряшенцев Д. С.¹, Бурмистров В. А.¹

¹ФГБОУ ВО «ЧелГУ», Челябинск, Россия, ryashentsev_dmitry@mail.ru

Соединения нитрида бора могут иметь различную кристаллическую структуру, аналогичную соединениям углерода, такие как алмаз и графен [1-3]. Аллотропная разновидность углерода в виде алмаза может иметь множество полиморфных разновидностей [4]. В связи с этим возможно существование подобных аналогов структурных разновидностей для нитрида бора. Методом DFT-GGA была доказана возможность стабильного существования ряда новых полиморфов нитрида бора с алмазоподобной структурой, таких как: BN-s; BN-г и BN-LA4 – BN-LA7, BN-TA1 – BN-TA3 [5-7]. Модельное построение BN-TA-фаз может быть осуществлено в результате «сшивки» одностенных нанотрубок из нитрида бора. В связи с тем, что свойства полиморфных разновидностей могут варьироваться в широких пределах, необходимо изучение новых фаз нитрида бора и расчет их ожидаемых свойств. В данной работе представлены результаты модельного исследования алмазоподобных фаз, которые могут быть получены из однослойных нанотрубок BN.

Элементарная ячейка полиморфной разновидностей нитрида бора BN-TA4 относится к гексагональной сингонии, а BN-TA5 и BN-TA6 относятся к тетрагональной сингонии, в которых содержатся от 24 до 32 атомов. Значения векторов элементарных трансляций *a* и *b* находятся в промежутке от 7.0305Å (BN-TA4) до 7.1030Å (BN-TA6). Значение вектора элементарных трансляций *c* для данных структур находится в диапазоне от 4.2384Å (BN-TA6) до 4.4207Å (BN-TA4). В алмазоподобной фазе BN-TA6 наблюдается три различные длины связи и четыре неэквивалентных угла между связями, а в алмазоподобных фазах BN-TA4 и BN-TA5 имеются четыре различные длины связей и шесть различных неэквивалентных углов. В результате анализа кольцевых параметров Уэллса было определено, что в алмазоподобных фазах нитрида бора BN-TA4 и BN-TA5 кольца состоят из четырех, шести и восьми звеньев, в то время как в алмазоподобной фазе BN-TA6 кольца состоят только из четырех и шести звеньев. Расчетные значения объемных плотностей находятся в диапазоне от 2.6134 г/см³ – наблюдается для фазы BN-TA4, до 3.0836 г/см³ - у фазы BN-TA6. Значение ширины запрещенной зоны для каждой алмазоподобной фазы определялась в результате расчета плотностей электронных состояний. Для алмазоподобных фаз ТА-типа значение ширины запрещенной зоны изменяется в диапазоне от 5.3664 эВ (BN-TA5) до 5.7444 эВ (BN-TA4).

Литература

1. Hoffmann D.M. // Physical Review B. – 1984. – V. 30. P. – 6051.
2. Rodriguez-Hernandez P. // Physical Review B. – 1995. – V. 51. P. – 14705-14708.
3. Xiong J. // Journal of Energy Chemistry. – 2020. – V. 40. P. – 99-111.
4. Беленков Е.А., Грешняков В.А. // Физика Твёрдого Тела. – 2016. – Т. 58. С. – 2069-2078.
5. Ряшенцев Д.С., Беленков Е.А. // Челябинский Физико-Математический Журнал. – 2020. – Т. 5. С. – 480-492.
6. Ряшенцев Д.С., Беленков Е.А. // Физико-Химические Аспекты Изучения Кластеров, Наноструктур и Наноматериалов. – 2020. – №12. С. – 493-503.
7. Ryashentsev D.S., Belenkov E.A. // Journal of Physics: Conference Series. – 2022. – V. 2373. P. – 022067.

АНАЛИЗ МИКРОСТРУКТУР НА ГРАНИЦЕ КОНТАКТНОГО ПЛАВЛЕНИЯ АМГ6 И СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ Zn

Баталова Е. А.¹, Шутов И. В.¹, Камаева Л. В.¹, Королев М. Н.², Кривилев М. Д.^{2,1}

¹УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия, elizaveta.smagina.97@mail.ru

²УдГУ, Ижевск, Россия, shutiny@gmail.com

В современном транспортном машиностроении, включая авиационную и космическую отрасли, широко используются сплавы марки АМг, соответствующие тройной системе Al–Mg–Mn. Сплавы АМг сочетают в себе высокую пластичность, коррозионную стойкость, а при большом содержании Mg обладают высокими механическими свойствами. Сплавы АМг обладают отличной свариваемостью в среде аргона и защитной атмосфере, поэтому при создании сборных конструкций в основном используется технология сварки. При этом в ряде технических задач при создании космической техники требуется соединять тонкостенные конструкции Al-сплавов, подверженные циклическим вибрационным нагрузкам. В этом случае метод сварки неприменим, основным методом соединения деталей является пайка. Пайку можно отнести к физико-химическому методу неразъемного соединения деталей, при этом необходимо учитывать многие факторы, влияющие на эксплуатационные свойства соединений. В работе исследована структура зоны контактного сплавления после лужения сплава АМг6 с припоем на основе Zn, а также бинарным модельным сплавом Zn-Al.

Образцы для исследования представляли собой пластины АМг6 размерами 20x15 мм. Перед термическими испытаниями поверхность образцов подвергалась лужению припоем HTS-2000 с химическим составом 97% Zn, 2% Cu, 1% Al. После чего слой припоя выводили механически, достигая значения толщины слоя припоя в 0.1 мм. Далее образцы нагревались до 400 °С с контролем температуры с помощью ПИД регулятор ТРМ251 и термопары хромель-алюмель. Время температурной выдержки для серии испытаний выбиралось 1 и 2 минуты. Скорость нагрева составила 50 °С/мин., скорость охлаждения 10 °С/мин. После температурных испытаний образцы исследовались с помощью автоматизированной системы микроструктурного анализа SIAMS 800 и оптического микроскопа Olympus. Полученные микроструктуры сопоставлялись с микроструктурами контактного взаимодействия при тех же режимах термообработки пластин АМг6 и бинарного сплава Zn-Al.

Выявлено, что Zn в силу высокой диффузионной подвижности приводит к формированию развитой микроструктуры со сложным фазовым составом. Показано, что микроструктура сплава АМг6 с припоем на основе Zn включает твердые растворы Al(Zn) и Zn(Al), интерметаллидную фазу Cu-Zn и эвтектические структуры. Показано, что формирование интерметаллидной фазы приводит к измельчению двойной эвтектики Al(Zn) и Zn(Al), которая также включает структуры распада высокотемпературного твердого раствора на основе Zn с большим содержанием Al, чем низкотемпературный.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00912, <https://rscf.ru/project/22-22-00912/>

ВЛИЯНИЕ ЗАМЕЩЕНИЙ ИОНАМИ ИТТРИЯ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$

Ковалев О.Е., Михайлов В.И., Тарасенко Т.Н., Кравченко З.Ф.

ГБУ «Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина»,
г. Донецк, Россия, oleg_kovalev_2018@mail.ru

Магнитные свойства мультиферроика BiFeO_3 (BFO) тесно связаны с локальной структурой октаэдра FeO_6 [1]. Ионы Y^{3+} с гораздо меньшим ионным радиусом, чем у иона Bi^{3+} , сильно дестабилизируют фазу $R3c$, характерную для "чистого" BFO, что снижает коэффициент устойчивости и увеличивает угол наклона октаэдра. Изменение кристаллической симметрии от ромбоэдрической (пространственная группа $R3c$) к орторомбической (пространственная группа $Pbnm$) наблюдается при созамещении в BFO [2].

Цель работы – изучение особенностей кристаллической структуры и магнитных свойств образцов мультиферроиков $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$ при замещении ионов Bi^{3+} ионами Y^{3+} в BFO.

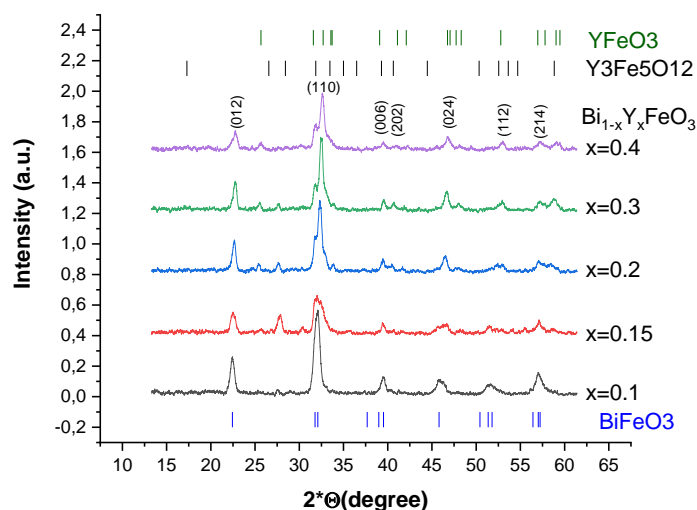


Fig. 1. Рентгенодиффрактограммы образцов мультиферроиков $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.1, 0.15, 0.2, 0.3, 0.4$) при комнатной температуре.

Нами получено усиление ферромагнитных свойств в Y-замещенном BiFeO_3 : $M_s(0.2) = 6.3$ emu/g, $M_s(0.3) = 11.7$ emu/g. Значение M_s для $x = 0.2$ примерно равно значению $M_s = 6.277$ emu/g для $x = 0.2$, полученному в работе [3]. Рассматривается и вариант присутствия в керамике $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.2$ и 0.3) кластеров с большими ферромагнитными моментами, которые упорядочиваются параллельно в магнитном поле, содержащих, например, железо-иттриевый гранат $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ [3]. Но как видно из Рис. 1, нет четкого совпадения положений основных рефлексов структуры $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ с рефлексами исследуемых мультиферроиков $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$.

Рентгенофазовый анализ образцов $\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{FeO}_3$ (Рис. 1) показал, что в них, помимо ромбоэдрической фазы $R3c$, наблюдается наличие орторомбической фазы (пространственная группа $Pbnm$). При $x \leq 0.1$ структура образца незначительно отличается от исходной ромбоэдрической структуры "чистого" BFO. С дальнейшим ростом степени замещения ($x > 0.15$) наряду с рефлексами структуры $R3c$ появляются рефлексы структуры $Pbnm$. Но для концентраций $x = 0.2, 0.3$ и 0.4 пик (110) начинает раздваиваться.

Литература

1. Пятаков А.П., Звездин А.К. // Успехи физ. наук. - 2012. - Т. 182, № 6. - С. 593-620.
2. Pandey R., Pradhan L.K. et al. // Ceramic International. - 2018. - V. 44 (15). - P. 18608-18616.
3. Feng, B.L. Structure and multiferroic properties of Y-doped BiFeO_3 ceramics / B.L. Feng, H. Xue, Zh.X. Xiong // Chinese Science Bulletin. - 2010. - V. 55, No 4-5. - P. 452-456.

КОМПАКТНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ИНФОРМАЦИИ О ЛОКАЛЬНОЙ СТРУКТУРЕ ВЕЩЕСТВА В МЕТОДАХ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ЗАДАЧ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ XANES СПЕКТРОСКОПИИ

Викленко И. А.¹, Дурыманов В. А.¹, Авакян Л. А.¹,
Гладченко-Джевелекис Я. Н.¹, Срабионян В. В.¹

¹ Южный федеральный университет,
физический факультет, Ростов-на-Дону, Россия

E-mail: viklenko@sfedu.ru

Задачам получения информации о локальном атомном строении вещества уделяется большое внимание в материаловедении. Одним из широко используемых и развивающихся методов получения такой информации является спектроскопия рентгеновского поглощения в энергетическом интервале до ~50 эВ относительно края поглощения (XANES). Этот метод обладает высокой чувствительностью к локальному строению вещества вблизи поглощающего атома и позволяет исследовать структуру вещества даже в отсутствии дальнего порядка. Однако, получение информации об атомной структуре вещества по данным XANES является достаточно сложной и ресурсоемкой задачей. Для ускорения и упрощения этого процесса применяются методы машинного обучения (МО) [1]. Наиболее распространенным является подход обучения моделей МО с учителем, который требует наличия достаточного объема промаркированных данных. Существует множество крупных баз данных структурной информации (AFLOW, MaterialsProject, OMDb, QM9 и др.), однако на практике часто встречаются специфичные задачи, для решения которых необходимо формировать обучающий набор данных практически с нуля.

При применении методов МО к решению научных задач исследователи неизбежно сталкиваются с проблемой удобного представления входных данных. В случае материаловедения зачастую в качестве входных данных используются сведения о локальной атомной структуре строения вещества [2]. Для улучшения качества работы методов МО, а также для учета физики процесса, функция представления данных о структуре вещества должна быть инвариантной по отношению преобразованиям поворота, отражения и сдвига структуры как единого целого, а также такое представление должно быть инвариантно к изменению нумерации атомов в системе. Таким образом, функция представления должна быть однозначно определена для любой рассматриваемой структуры и, при этом, отражать небольшие изменения в них, а её вычисление должно быть значительно быстрее прямого вычисления интересующего целевого значения (физического свойства) [2].

В данной работе предложен метод представления данных о локальной атомной структуре в виде гистограмм всевозможных парных расстояний и радиальных функций распределения для решения задачи определения структуры центров окраски серебра в натриево-известковых стеклах по данным спектров рентгеновской абсорбционной спектроскопии вблизи края поглощения (XANES).

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 23-21-00526.

Литература

1. Timoshenko J. et al. Supervised Machine-Learning-Based Determination of Three-Dimensional Structure of Metallic Nanoparticles // J. Phys. Chem. Lett. 2017. Vol. 8, № 20. P. 5091–5098.
2. Himanen L. et al. Dscribe: Library of descriptors for machine learning in materials science // Comput. Phys. Commun. 2020. Vol. 247. P. 106949.

ВЛИЯНИЕ ПОКРОВНОГО СЛОЯ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ HgTe/CdHgTe С ДВОЙНЫМИ КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ НА СПЕКТРЫ ОСТАТОЧНОЙ ФОТОПРОВОДИМОСТИ

Сотничук М. К.¹, Казаков А. С.¹, Николаев И. Д.¹, Менщиков Р. В.²,
Дворецкий С. А.², Михайлов Н. Н.², Хохлов Д. Р.¹, Иконников А. В.¹

¹Физический факультет, МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия,

²ИФП СО РАН, Новосибирск, Россия

antikon@physics.msu.ru

Эффект остаточной фотопроводимости (ОФП), заключающийся в изменении проводимости образца под действием света и сохранении установившегося значения после выключения подсветки, может использоваться как эффективный и простой метод управления концентрацией носителей заряда. Недавно [1] было показано, что этот эффект может приводить не только к изменению концентрации носителей заряда, но даже к *обратимой* смене типа проводимости. Последнее было продемонстрировано в двойных квантовых ямах (ДКЯ) HgTe/CdHgTe, которые сами по себе являются интересными объектами с нетривиальными топологическими свойствами [2]. В этой связи возможность управления концентрацией и типом проводимости с помощью подсветки в таких объектах видится весьма полезной.

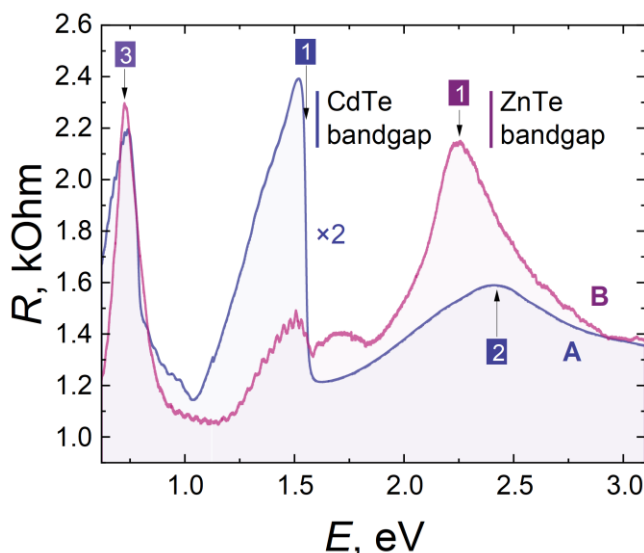


Рис. 1. Измеренные при $T = 4.2$ К спектры ОФП ДКЯ HgTe, с покровными слоями CdTe (А) и ZnTe (В). Цифрами обозначены основные спектральные особенности.

ZnTe связана с диффузией атомов Hg (и Cd, в случае образца В) из барьеров CdHgTe в ПС. Особенность 2 в образце А связана с переходами из спин-отщепленной зоны барьерного слоя CdHgTe в зону проводимости ПС CdTe. Наконец, особенность 3, положение которой не зависит от состава ПС, предположительно связана с переходами между спин-отщепленной зоной КЯ HgTe в валентную зону барьеров CdHgTe.

Работа выполнена при поддержке РФФ (№ 22-22-00382).

Литература

1. I. Nikolaev, A. Kazakov, K. Drozdov et al. // *J. Appl. Phys.* — 2022. — V. 132. — P. 234301.
2. S. S. Krishtopenko, W. Knap, F. Teppe // *Sci. Rep.* — 2016. — V. 6. — P. 30755.

ПРОТОТИП ТАКТИЛЬНОГО ДАТЧИКА ДЕФОРМАЦИИ НА ОСНОВЕ БИОЛОГИЧЕСКОГО НАНОМАТЕРИАЛА

**Ичкитидзе Л.Ц.^{1,2}, Петухов В.А.¹, Батракова И.А.², Горина А.В.²,
Демиденко Н.А.¹, Герасименко А.Ю.^{1,2}, Тельшев Д.В.^{1,2}, Селищев С.В.¹**
¹Научно исследовательский университет МИЭТ, Зеленоград, Москва, Россия
*²Первый Московский государственный медицинский университет
имени И.М. Сеченова, Москва, Россия, ichkitidze@bms.zone*

Наиболее чувствительные механические рецепторы расположены на кончиках языка и пальцев рук человека. Их чувствительность к деформациям находится в диапазоне давлений $P \sim 2-5$ мг/мм² (20-50 Па). Тактильные датчики для робототехники с чувствительностью до $P \leq 1$ Па уже создаются, но они имеют не подходящую степень биосовместимости, и их использование в медицинских приложениях невозможно. В данной работе исследовался прототип резистивного тактильного датчика на основе тонкой пленке, содержащей матрицу микрокристаллической целлюлозы (МКЦ, биологический материал) и наполнитель из многостенных углеродных нанотрубок (МУНТ), т.е. исследуется пленочный биологический наноматериал МКЦ/МУНТ, как датчик деформации изгиба.

Биологический наноматериал МКЦ/МУНТ содержал МКЦ типа MCG 811 F фирмы VIVAPUR, и МУНТ типа «Таунит МД». Методами УЗ и магнитного перемешивания готовились водные дисперсии состава 2 мас. % МКЦ и 0,1 мас. МУНТ. Водную дисперсию наносили на гибкую подложку из технического полиэтилена (ПЭТ, толщина $d_0 \sim 30$ мкм). ПЭТ- подложка имела массу ~ 5 мг, а нанесенные на нее пленки имели размеры: (200-500) нм \times 5 мм \times 25 мм. Пленка МКЦ/МУНТ служила тензочувствительным элементом (ТЧЭ). Деформация и измерения физических параметров ТЧЭ проводились автоматически, данные сохранялись в компьютере. Определялись угол θ изгиба ТЧЭ, его сопротивление R и температура, количество изгиба, а также текучее время. Величина θ варьировалась в пределах $\pm 100^\circ$ шагом 2° . Считается, что при отсутствии деформации $\theta=0$, при вогнутости $\theta>0$, при выпуклости $\theta<0$. МЧЭ толщиной $d \sim 200$ нм показал оптическую прозрачность $T \sim 82\%$ и сопротивление $R_0 \sim 150$ кОм, а МЧЭ при $d \sim 500$ нм: $T \sim 68\%$ и $R_0 \sim 20$ кОм. Получена максимальная тензочувствительность $(1/R_0)dR/d\theta \sim 0,33\%$ /град.

Исследуемые пленки проявляли свойства биполярного датчика деформации, т.е. при изгибе в виде вогнутости сопротивление уменьшалось, а при изгибе в виде выпуклости сопротивление увеличивалось. По-видимому, такое поведение обусловлено тем, что при изгибе в виде вогнутости величина R уменьшается за счет приближения МУНТ между собой и увеличения между ними контактов, а при изгибе в виде выпуклости R уменьшается за счет увеличения расстояние между ними.

Пленки биологического наноматериала МКЦ/МУНТ, содержащие $\leq 0,1\%$ мас. МУНТ, в зоне нагрузки 5-30 мг регистрировались минимальное давления до 5 Па. Следовательно, рассматриваемый прототип тактильного датчика на основе биологического наноматериала может быть основой для создания устройств для медицины (малоинвазивная хирургия, высокочувствительная пальпация, эндоскопия и др.) [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (госзадание №075-03-2023-024). Исследования в Сеченовском университете в части получения биологического наноматериала финансировались Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (соглашения № 075-15-2021-596).

ИЗМЕРЕНИЕ УДЕЛЬНОГО ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ НИКЕЛЯ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ СТУПЕНЧАТО-ЦИКЛИЧЕСКОГО УДАРНОГО СЖАТИЯ

А.А. Голышев, А.М. Молодец

ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка, Россия, golyshev@icp.ac.ru

Согласно современным представлениям, никель, наряду с железом, является важным компонентом расплавленного внешнего и твёрдого внутреннего ядер Земли. Электрофизические свойства железа и никеля при высоких давлениях играют ключевую роль в моделировании электрофизических свойств и магнетизма Земли. Оценки давления внутреннего ядра имеют порядок сотен гигаскалей. Поэтому измерения электропроводности никеля в условиях мегабарных давлений остаются актуальными для современных геофизических приложений [1, 2].

Исследования электрофизических свойств сильно сжатого никеля проводятся главным образом в условиях статического сжатия алмазных наковален [1, 2]. Наряду с этим измерения электросопротивления никеля предпринимались и в условиях однократного ударного сжатия [3]. В работе [3] обнаружена резкая обратимая аномалия при давлениях $P_1 \sim 20$ ГПа и $P_2 \sim 28$ ГПа. Авторы [3] предположили, что данная аномалия в изменении электросопротивления связана со структурной перестройкой электронных оболочек атома никеля. Исследований никеля при ступенчатом ударном сжатии в доступной литературе не обнаружено. Особенность этой техники заключается в том, что здесь оказывается возможным достигать состояния вне однократной ударной адиабаты и тем самым исследовать изменение электрофизических свойств никеля в расширенной области его фазовой диаграммы.

В представляемой работе выполнено измерение электросопротивления образцов никеля при высоких динамических давлениях ступенчатого ударного сжатия в диапазоне давлений 5-75 ГПа и температур 77-800 К и определена объёмно-температурная зависимость его удельного электросопротивления. Давления в окружающей изоляционной среде контролировались манганиновыми датчиками. Температура никелевых образцов рассчитывалась с помощью гидрокода, опирающегося на разработанные уравнения состояния никеля.

Показано, что в области давлений до 20 ГПа величина электрического сигнала ударно-сжимаемого никеля коррелирует со скоростью деформации образца. В диапазоне давлений 20-75 ГПа происходит процесс изменения магнитных свойств никеля, который завершается во фронте первой ступени ударного сжатия при давлении 28 ГПа. Этот сценарий оправдывается возможностью адекватного моделирования экспериментальных профилей электросопротивления никеля с помощью объёмно(V)-температурной(T) зависимости его удельного электросопротивления $\rho = \rho(V, T)$.

Работа выполнена в рамках Госзадания № АААА-А19-119071190040-5.

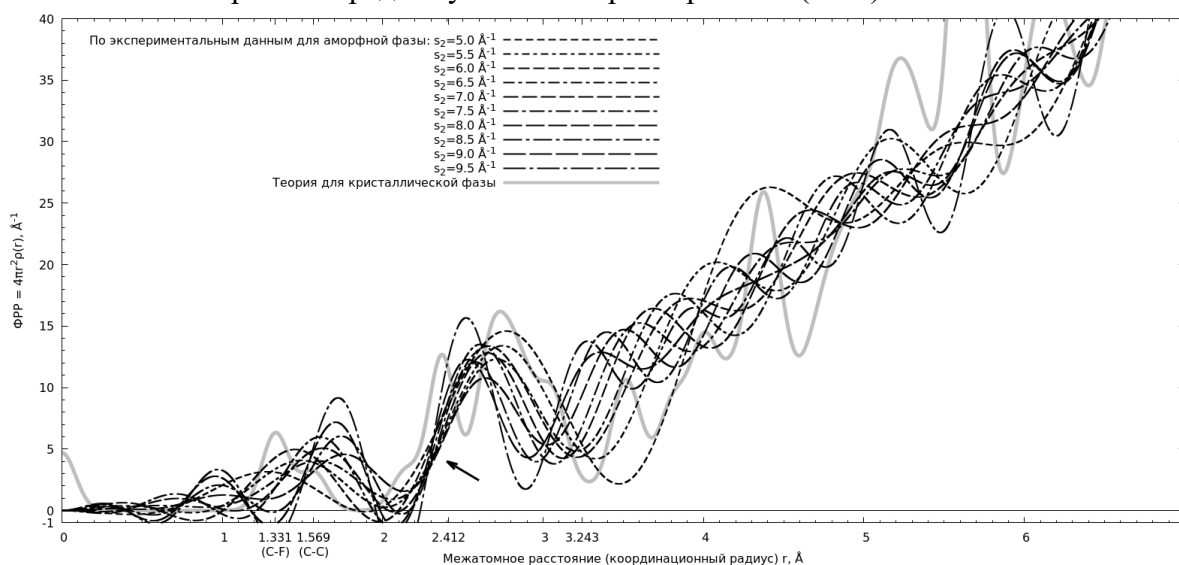
Литература

1. Silber R. E., Secco R. A., Yong W. Constant electrical resistivity of Ni along the melting boundary up to 9 GPa // *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. – 2017. – Т. 122. – №. 7. – С. 5064-5081.
2. Pu F. Electron transfer and electrical resistance of nickel under high pressure up to 42 GPa // *Physics Letters A*. – 1991. – Т. 157. – №. 2-3. – С. 151-154.
3. В. В. Комиссаров, М. Н Павловский. Об аномалии в электропроводности ударно сжатого никеля при давлении ~ 23 ГПа // *Физика твёрдого тела*. – 1999. – Т. 41. – №. 3. – С. 369-371.

СТРУКТУРА АМОРФНОЙ ФАЗЫ ПОЛИТЕТРАФТОРЭТИЛЕНА (ПТФЭ) ПО ДАННЫМ ПРЕЦИЗИОННОЙ ЭЛЕКТРОНОГРАФИИ

Кулыгин А. К.¹, Садовская Н. В., Авилов А. С.²
 ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия
¹ kuligin57@gmail.com; ² avilovanatoly@mail.ru

ПТФЭ – высокомолекулярным продукт полимеризации тетрафторэтилена C_2F_4 , состоит из длинных полимерных цепочек $(CF_2)_n$, которые, в зависимости от условий и предыстории (p , T) могут иметь жёсткую спиральную конформацию (известно 2 типа) или разупорядоченное строение, а также образовывать упорядоченную (кристаллическую, также известно 2 типа) или неупорядоченную («аморфную») укладку друг относительно друга. Разные типы укладки могут присутствовать в одном образце в виде соседствующих микроструктур в состоянии равновесия. Была изготовлена тонкая аморфная плёнка ПТФЭ из мелкодисперсной водной суспензии ПТФЭ путём осаждения, высушивания и отжига (спекания), от которой получена электронограмма на просвет ($U_{уск}=100$ кВ), решены возникшие проблемы с зарядом и микропорами на образце. Электронограмма имела характерный вид для аморфных структур (набор широких колец-гало), что послужило мотивацией применить для её анализа, в т. ч. построение функции радиального распределения атомов (ФРР), ранее разработанной методики для аморфных структур. Построен набор ФРР для различных значений верхнего предела углового параметра $s_2=4\pi(\sin \theta)/\lambda$.



Полученные кривые ожидаемо не имеют полного сходства с ФРР (т. к. исследованная структура заведомо не является полностью аморфной, в расположении атомов как минимум присутствует упорядоченность вдоль полимерных цепей). В тоже время отдельные детали графиков поддаются разумной интерпретации. Так, на всех графиках присутствует пик с площадью, близкой к 2, что соответствует среднему количеству исходящих ковалентных связей на атом (С и F), а расположение на оси абсцисс согласуется с длинами связей С–С и С–F. Следующие (расположенные правее) пики на всех графиках имеют совпадающую левую границу в районе $r=2.412$ Å, что соответствует (по литературным данным) расстоянию между ближайшими атомами соседних полимерных цепочек в кристаллической фазе ПТФЭ с их гексагональной упаковкой (логично ожидать похожего и в аморфной фазе). Наконец, правые границы этих пиков располагаются в районе $r=3.243$ Å, что соответствует литературным данным о толщине (диаметре) спиралевидных полимерных цепей $(CF_2)_n$.

ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ ИМПУЛЬСНЫМ ЭЛЕКТРОННЫМ ПУЧКОМ НА ЗОНУ КОНТАКТА СИСТЕМЫ «ПОКРЫТИЕ/ПОДЛОЖКА»

Ефимов М. О., Громов В. Е., Шлярова Ю. А., Панченко И. А.

Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия,

E-mail: moefimov@mail.ru

Целью настоящей работы является анализ структурно-фазовых состояний зоны контакта слоя ВЭС (покрытие), сформированного методом проволочно-дугового аддитивного производства на сплаве 5083 (подложка) и подвергнутого электронно-пучковой обработке.

В качестве материала исследования использована система «покрытие/подложка». Покрытием являлся высокоэнтропийный сплав элементного состава Mn-Cr-Fe-Co-Ni, который был сформирован на подложке методом проволочно-дугового аддитивного производства. Подложкой являлся сплав на основе 5083. Облучение зоны контакта системы «покрытие/подложка» интенсивным импульсным электронным пучком осуществляли на установке «СОЛО» при следующих параметрах процесса: энергия ускоренных электронов $U = 18$ кэВ, плотность энергии пучка электронов $E_s = 30$ Дж/см², длительность импульса пучка электронов $t = 200$ мкс, количество импульсов $N = 3$, частота следования импульсов $f = 0,3$ с⁻¹. Облучение осуществляли в вакууме при давлении остаточного газа (аргон) в камере установки $p = 0,02$ Па.

Методами современного физического материаловедения выполнены исследования элементного и фазового состава, состояния дефектной субструктуры сплава, формирующегося в зоне контакта системы «подложка/покрытие». Выявлено взаимное легирование покрытия и подложки в слое толщиной ≈ 1700 мкм. Показано, что высокоскоростное охлаждение зоны контакта системы «покрытие/подложка», имеющее место при термическом воздействии, инициированном импульсным электронным пучком, привело к формированию многоэлементной, многофазной субмикронанокристаллической структуры. Установлено, что контактный слой, примыкающий к подложке имеет структуру высокоскоростной ячеистой кристаллизации. Объем ячеек сформирован твердым раствором магния в алюминии, что соответствует сплаву 5083; по границам ячеек располагаются прослойки второй фазы, обогащенные атомами, формирующими покрытие и подложку. Центральная область зоны контакта сформирована кристаллитами пластинчатой формы, что может указывать на их эвтектическую природу образования. Основным химическим элементом данной области является алюминий (≈ 77 ат.%). Контактный слой, примыкающий к покрытию, имеет структуру высокоскоростной ячеистой кристаллизации. Объем ячеек сформирован сплавом состава 0.17Mg-20.3Al-4.3Cr-16.7Fe-9.3Co-49.2Ni, что соответствует ВЭС, легированному элементами подложки; прослойки второй фазы, расположенные по границам ячеек, обогащены магнием и, в меньшей степени, атомами, формирующими покрытие.

КОРРОЗИОННОЕ И ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО СПЛАВА FeCoCrNiMo В РАСПЛАВЕ «СОЛНЕЧНОЙ» СОЛИ (60 мас. % NaNO₃ + 40 мас. % KNO₃)

Козулина Д. О.

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

e-mail: kozulinadaria5@gmail.com

В настоящее время повышается интерес к альтернативным источникам энергии. Солнечная энергия составляет чистый и бесконечный возобновляемый ресурс, который может генерировать электричество. Обладая такими свойствами, как высокая термическая стабильность, низкая температура плавления и высокая плотность энергии, так называемая, «солнечная» соль (60 мас. % NaNO₃ + 40 мас. % KNO₃) считается самым перспективным теплоносителем для современных электростанций. Однако «солнечная» соль вызывает коррозию при рабочих температурах (около 600 °С) из-за наличия окислителей, таких как нитрат, нитрит-ион, кислорода и др. В связи с этим ведется поиск материала, который обладает повышенной коррозионной стойкостью в представленных условиях. Сейчас активно проводятся исследования высокоэнтропийных материалов, в том числе сплавов системы CoCrFeNi [1].

Целью данной работы является определение коррозионной стойкости ВЭС FeCoCrNiMo по результатам длительных испытаний в расплаве соли NaNO₃+KNO₃, а также оценка возможности прогнозирования коррозионной стойкости по результатам ускоренных испытаний.

В настоящей работе коррозионная стойкость ВЭС FeCoCrNiMo, полученного методом вакуумно-дуговой плавки и отожженного при 900 °С в течение 60 минут [2], исследована с помощью гравиметрических испытаний, электрохимических измерений, а также методами электронной микроскопии.

В работе проводили исследование коррозионной стойкости высокоэнтропийного сплава CoCrFeNiMo в расплаве соли 60 мас. % NaNO₃ и 40 мас. % KNO₃ при 565 °С. Установлено, что ВЭС CoCrFeNiMo является более коррозионностойким при данных условиях, чем коррозионностойкая сталь AISI 316L. Скорость коррозии ВЭС CoCrFeNiMo и стали в расплаве соли NaNO₃ и KNO₃ равняются:

$C_{R \text{ CoCrFeNiMo}} = 7.1 \cdot 10^{-7} \text{ см/ч} = 0.06 \text{ мм/год}$, $C_{R \text{ AISI 316L}} = 4.5 \cdot 10^{-3} \text{ см/ч} = 350.4 \text{ мм/год}$.

При взаимодействии ВЭС CoCrFeNiMo с расплавом соли 60 мас. % NaNO₃ и 40 мас. % KNO₃ при 565 °С образуются коррозионные продукты, предположительно состоящие из оксидов железа, кобальта, никеля и хрома.

Литература

1. Jeremy T. Moon, Eric J. Schindelholz, Michael A. Melia, Andrew B. Kustas, Dev Chidambaram Corrosion of Additively Manufactured CoCrFeMnNi High Entropy Alloy in Molten NaNO₃-KNO₃
2. Z. Niu, Y. Wang, C. Geng, J. Xu, Y. Wang, Microstructural evolution, mechanical and corrosion behaviors of as-annealed CoCrFeNiMox (x = 0, 0.2, 0.5, 0.8, 1) high entropy alloys, J. Alloys Compd. 820 (2020) 153273

ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЕ КАРБИДНОЙ ФАЗЫ И АТОМОВ УГЛЕРОДА В ДИФФЕРЕНЦИРОВАННО ЗАКАЛЕННЫХ РЕЛЬСАХ ПРИ ЭКСПЛУАТАЦИИ

Порфирьев М. А., Громов В. Е., Юрьев А. А., Шлярова Ю. А., Крюков Р. Е.
Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия,
E-mail: mporf372@gmail.com

Эксплуатация рельсов сопровождается деформационным преобразованием структуры перлита, одним из проявлений которого является разрушение и растворение пластин цементита. Выполненные оценки показали, что вне зависимости от направления исследования объемная доля цементита увеличивается от 4,5% на поверхности до 10,4% на глубине 10 мм при анализе вдоль центральной оси и от 3,1% до 9,6% вдоль радиуса скругления рабочей выкружки, соответственно (таблица 1). Выполненные таким образом оценки показывают, что концентрация углерода в слое на глубине 2 мм равна 0,26% масс., а в поверхностном слое выкружки составляет 0,22% масс. Для центральной оси симметрии эти значения составляют 0,59 % масс. и 0,32% масс., соответственно (таблица 1).

Таблица 1 – Количественные характеристики структуры рельсов после пропуска 1770 млн. тонн брутто

Параметры, средние по анализируемому слою	Поверхность катания			Рабочая выкружка		
	10 мм	2 мм	Поверхность	10 мм	2 мм	Поверхность
Объемная доля Fe ₃ C	10,4%	8,2%	4,5%	9,6%	3,6%	3,1%
Доля углерода	0,74%	0,59%	0,32%	0,69%	0,26%	0,22%

Согласно литературным данным оценку количества атомов углерода, формирующих карбид железа Fe₃C проводили, используя выражение $\Delta C = (Fe_3C) = 0,07\Delta V$, где ΔV – объемная доля частиц карбидной фазы.

Выявленная потеря углерода может быть обусловлена как обезуглероживанием поверхностного слоя металла рельсов в процессе сверхдлительной эксплуатации, так и выходом атомов углерода на дефекты структуры стали – линии дислокаций, границы зерен и субзерен, т.е. реализацией процесса динамического старения стали. Взаимодействие дислокаций с атомами внедрения приводит к закреплению дислокаций, препятствующему их дальнейшему движению, способствуя существенному упрочнению материала, приводя, в конечном итоге, к его охрупчиванию. Если в исходном состоянии основное содержание углерода соответствует частицам цементита, то после эксплуатации рельсов местом расположения углерода, наряду с частицами цементита, являются дефекты кристаллической структуры стали (дислокации, границы зерен и субзерен), а в поверхностном слое стали углерод обнаруживается и в кристаллической решетке α -железа.

Установлено, что процессы эволюции/деградации карбидной фазы и перераспределения атомов углерода наиболее интенсивно реализуются в поверхностных слоях до 2 мм. Увеличение пропущенного тоннажа также сопровождается заметным перемещением атомов углерода на дефекты структуры стали в рабочей выкружке по сравнению с поверхностью катания.

ELECTRON-ION-PLASMA SURFACE MODIFICATION OF SILUMIN**Shliarova Yu. A., Shlyarov V. V., Zagulyaev D. V., Gromov V. E.***Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia*

E-mail: rubannikova96@mail.ru

In this work, a complex processing of hypereutectic silumin was carried out, combining electroexplosive doping of the surface layer with yttrium oxide powder and subsequent irradiation with a pulsed electron beam. It is shown that the complex treatment is accompanied by the formation of a multiphase submicron-nanocrystalline structure in the surface layer of high-speed cellular aluminum crystallization. It has been established that the volume of crystallization cells is enriched with aluminum atoms; formed by a solid solution based on aluminum. Along the boundaries of the cells, there are nanocrystalline interlayers formed by particles of silicon and yttrium oxysilicide. It is shown that complex treatment at an electron beam energy density of 25 J/cm^2 is accompanied by an increase in the wear resistance of modified samples by 7.9 times and a decrease in the friction coefficient by 1.7 times relative to cast silumin in the initial state. The microhardness of the surface layer of silumin modified in this way increases (relative to the initial state) by 1.5 times. An increase in the energy density of the electron beam up to 35 J/cm^2 is accompanied by an increase (relative to samples modified at an energy density of the electron beam up to 25 J/cm^2) in the wear parameter of silumin by 2.1 times, the coefficient of friction by 1.13 times and a decrease in microhardness by 1,3 times, remaining, nevertheless, higher than the indicated characteristics of the silumin of the initial state. It has been suggested that a multiple increase in the wear resistance of silumin subjected to complex treatment (both with respect to silumin in the cast state and with respect to eutectic silumin modified in a similar way) is due to the presence in the surface layer of silicon inclusions that have not dissolved during modification, surrounded by a structure of high-speed cellular crystallization.

The research was supported by a grant from the Russian Science Foundation № 19-79-10059, <https://rscf.ru/en/project/19-79-10059/>.

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ДОМЕННЫХ СТЕНОК В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Чернышов Д. М.¹, Белов А. Ю.²

¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника», Москва, Россия,
daniil.chernyshov.2000@mail.ru

²ФНИЦ «Кристаллография и фотоника», Москва, Россия, belov@crys.ras.ru

Сегнетоэлектрические твердые растворы титаната бария-стронция являются биосовместимыми пьезоэлектриками с широким спектром приложений благодаря существенному усилению пьезоэлектрических и диэлектрических свойств $BaTiO_3$ при частичном замещении бария стронцием. Одним из важнейших аспектов такой модификации является ее влияние на нелинейные процессы при переключении поляризации (гистерезис), связанные со свойствами доменных стенок. На основе теории функционала плотности из первых принципов получены значения энергии 180° доменных стенок в $Ba_xSr_{1-x}TiO_3$ в зависимости от содержания атомов Sr. Для описания распределения Ba и Sr по узлам решетки использовалось приближение виртуального кристалла с эффективным псевдопотенциалом, построенным исходя из нормосохраняющих псевдопотенциалов Ba и Sr. В рамках обобщенного градиентного приближения (GGA) для обменно-корреляционной энергии показано, что замещение бария стронцием приводит к уменьшению энергии доменной стенки γ_w (см. Рис. 1), что упрощает нуклеацию зародышей переполаризации [1].

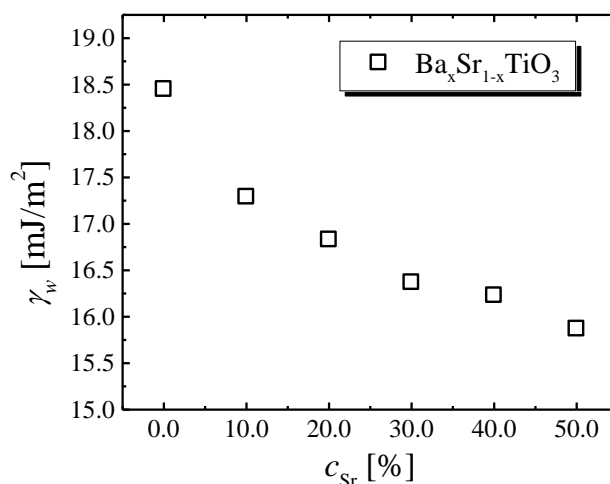


Рисунок 1. Зависимость энергии 180° доменной стенки с центром в плоскости Ba(Sr)O от содержания Sr.

В случае $BaTiO_3$ полученное в рамках GGA значение энергии доменной стенки γ_w значительно превышает известное из литературы значение $\gamma_w = 7.5$ mJ/m² [2], полученное в приближении локальной плотности (LDA), хотя обычно оба приближения приводят к сходным результатам. Обсуждаются возможные причины такого расхождения.

Литература

1. Белов А.Ю. // Письма в ЖЭТФ. – 2018. – Т. 108. – № 4. С. – 225-229.
2. Meyer B., Vanderbilt D. // Phys. Rev. B. – 2002. – VOL. 65. – № 10. – AN. 104111.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ АМОРФНОГО СПЛАВА $Al_{87}Ni_8Y_5$, ПОЛУЧЕННОЙ В РЕЗУЛЬТАТЕ УЛЬТРАЗВУКОВОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Першина Е. А.¹, Аронин А.С.¹, Чиркова В. В.¹

¹Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия, pershina@issp.ac.ru

Аморфные металлические сплавы (АМС) вызвали повышенный интерес сразу с момента их открытия в 1960-х годах. Сплавы на основе алюминия благодаря малому удельному весу, высокой прочности и коррозионной стойкости наряду с другими превосходными техническими свойствами стали весьма перспективными для многих областей применения. Вместе с тем пластичность таких материалов при комнатной температуре крайне низка, что сильно ограничивает их применение в качестве конструкционных материалов.

В настоящее время многие ученые нацелены на развитие и получение новых материалов и композитов на основе АМС, а также на изучение методов, способных обеспечить материалам высокую прочность, пластичность и вязкость разрушения. Научные работы последних лет показали, что применение термической и деформационной обработки позволяют создать композитные аморфно-нанокристаллические материалы на основе АМС путем замещения части аморфной матрицы на нанокристаллическую фазу, что позволяет получить материалы с оптимальным набором функциональных свойств.

Еще одним способом влияния на структуру аморфного материала является применение ультразвуковой (УЗ) обработки. Применение данного метода к аморфным материалам при комнатной температуре предлагает доступный и простой подход, позволяющий влиять на концентрацию и локализацию свободного объема в аморфном материале. В то же время применение метода УЗ обработки к аморфным сплавам был предложен совсем недавно, поэтому на сегодняшний день проведены только отдельные работы по изучению структуры, формирующейся в аморфных материалах с использованием данного метода, а результаты влияния ультразвуковых колебаний на микроструктуру и свойства аморфных сплавов противоречивы.

В данной работе представлены результаты исследования структуры аморфного сплава $Al_{87}Ni_8Y_5$ в виде лент после ультразвукового воздействия с частотой 22 кГц. УЗ воздействие проводилось путем прямого контакта соноэлектрода и образцов. Исследование проводилось методами рентгеновской дифракции и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Установлено, что УЗ воздействие в течение более 10 секунд приводит к кристаллизации образца и резкому увеличению доли кристаллической фазы. При этом был обнаружен значимый нагрев образцов (более 100°C). Для того, чтобы исключить влияние нагрева образца на изменение структуры при УЗ обработке, последующие эксперименты проводились в тefлоновом контейнере с водой с внешним охлаждением. С помощью метода ПЭМ обнаружено, что именно УЗ воздействие более 20 сек без значимого нагрева образца (менее 100°C) приводит к образованию многочисленных полос деформации с разветвленной структурой и нанокристаллической фазы. Образовавшиеся полосы деформации отчетливо видны в микромасштабе. Это свидетельствует о том, что обработка ультразвуком с частотой 22 кГц при плотном контакте соноэлектрода с образцом приводит к значимому перераспределению свободного объема в аморфном сплаве $Al_{87}Ni_8Y_5$. Данный метод обработки создает возможности для получения сплавов с заданными свойствами путём модификации их структуры.

Работа поддержана Российским научным фондом, грант № 22-73-00036.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЛИЧЕСТВЕННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК АНСАМБЛЕЙ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ РТСУ НАНОЧАСТИЦ ИЗ ИНФОРМАЦИИ О РАДИАЛЬНОМ РАСПРЕДЕЛЕНИИ АТОМОВ

Гладченко Я. Н.¹

¹Южный Федеральный Университет,
физический факультет, Ростов-на-Дону, Россия, ygl@sfedu.ru

Мы рассматриваем биметаллические наночастицы Pt-оболочка Cu-ядро, которые являются перспективными катализаторами реакции восстановления кислорода с активностью, сравнимой с активностью, достигаемой при использовании монометаллических частиц Pt.

Мы применяем алгоритмы машинного обучения (МО), адаптированные к синтетическим данным – радиальным функциям распределения, полученным в результате моделирования молекулярной динамики наночастиц разного размера, состава и архитектуры. Среди всех параметров радиальной функции распределения наиболее точно определяются расстояния между атомами в результате EXAFS анализа [1]. Поэтому, мы рассматривали возможность определения количественных параметров ансамблей наночастиц на основании информации о расстояниях между атомами $R_i(A-B)$, где $i = 1, 2, 3$ номер координационной сферы, А и В – типы атомов Pt или Cu.

Количественными параметрами являлись: размер наночастицы, доля атомов платины в наночастице, а также, для ансамблей наночастиц разных архитектур, доля наночастицы с архитектурой ядро-оболочка среди других архитектур. Оценка качества предсказаний осуществлялась с помощью метрики прогнозирования R^2 . Для задачи определения размера наночастиц достигнуто значение R^2 , равное 80%. Такая точность соответствует литературным данным анализа EXAFS [2]. Мы показали, что концентрация атомов платины в наночастицах может быть определена с более высокой точностью ($R^2 = 91\%$).

В реальных образцах присутствуют наночастицы различного размера и состава – ансамбли наночастиц. В этом случае следует рассматривать не одну единственную радиальную функцию, а их линейную комбинацию. Мы показали, что в случае “замешивания” двух архитектур наночастиц с различными весами удастся определить долю наночастиц с архитектурой ядро-оболочка с точностью, описываемой параметром R^2 , равной 75–80% в зависимости от архитектуры наночастиц примесей.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 23-21-00526. Выражаю особую благодарность моему научному руководителю Авакяну Л. А. д-ру физ.-мат. наук за значимые замечания и важнейшие советы при проведении исследования.

Литература

1. Teo, Boon K.. EXAFS: Basic Principles and Data Analysis // Springer Berlin Heidelberg, 2014.
2. Cooper C., Frenkel A., Vasic R, Yevick A. Modeling the Structure and Composition of Nanoparticles by Extended X-Ray Absorption Fine-Structure Spectroscopy // Annual Re-view of Analytical Chemistry. 2011. 4:1, 23-39.

ОСОБЕННОСТИ НЕУПРУГИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОМ ДЕФОРМИРОВАНИИ МЕТАЛЛОВ

Варюхин В.Н.,¹ Малащенко В.В.^{1,2,3}

¹Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, Донецк, РФ

²Донецкий национальный университет, Донецк, РФ

³Академия управления и государственной службы, Донецк, РФ

malashenko@donfti.dn.ua

Плотность дислокаций является одним из важнейших факторов, оказывающих существенное влияние на прочность и другие механические свойства металлов и сплавов. При квазистатической деформации зависимость предела текучести этих материалов от плотности дислокации весьма удовлетворительно описывается соотношением Тейлора. Однако при высокоскоростной пластической деформации металлов [1] зависимость становится более сложной и соотношение Тейлора нарушается. Для получения аналитических выражений этой зависимости может быть весьма полезной теория динамического взаимодействия дефектов (ДВД) [2-5]. В рамках этой теории в работе [4] были рассмотрены случаи, когда зависимость динамического предела текучести от дислокационной плотности становится немонотонной и имеет минимум. Такая зависимость действительно наблюдалась в эксперименте [6]. В работе [5] описан случай, когда исследуемая зависимость имеет максимум. Зависимость такого типа наблюдалась авторами работы [7]. В настоящей работе в рамках теории ДВД проанализировано высокоскоростное деформирование состаренного сплава и сформулированы условия, при выполнении которых зависимость динамического предела текучести от плотности дислокаций может иметь и минимум, и максимум. Теория ДВД является теорией конкурирующих взаимодействий. Динамическое торможение дислокаций зависит от того, какой вид структурных дефектов вносит главный как в величину этого торможения, так и в формирование спектра дислокационных колебаний, поскольку от вида этого спектра зависит эффективность диссипации дислокационной энергии, а, следовательно, и эффективность торможения. В данной работе подтверждается вывод, полученный ранее при исследовании других зависимостей в рамках теории ДВД, в частности, зависимости динамического предела текучести от скорости пластической деформации и концентрации точечных дефектов: минимум функции, описывающей соответствующую зависимость, наблюдается в точке, где происходит переход от доминирования вклада одного типа дефектов в формирование суммарного торможения к доминированию дефектов другого типа, максимум имеет место в точке, где происходит смена доминирующего вклада в формирование дислокационного спектра.

1. Mayer P.N., Mayer A. E. // J. Appl. Phys. 2016. V. 120. P. 075901.
2. Malashenko V.V. // Physica B: Phys. Cond. Mat., **404**, 3890 (2009).
3. Варюхин В.Н., Малащенко В.В. // Известия РАН. Серия физ. №9. С. 37 (2018).
4. Малащенко В.В. // ФТТ. 2022. Т. 64. № 8. С. 1012–1017.
5. Малащенко В.В. // ФТТ. 2020. Т. 62. № 10. С. 1683–1685.
6. H. Fan, Q. Wang, J. A. El-Awady, D. Raabe, M. Zaiser // Nat. Commun., **12**, 1845 (2021).
7. J. Syarif, K. Nakashima, T. Tsuchiyama, S. Takaki // Materials Science. **91**, P. 790 (2005).

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ ФУНКЦИИ ВИГНЕРА ЧАСТИЦЫ В ДВУМЕРНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

Бурков И.Д.¹, Сеидов С.С.¹

¹*НИТУ «МИСИС», Москва 119049, Россия, masterofphysic@mail.ru*

В работе рассматривается динамика функции Вигнера частицы, находящейся в двумерной потенциальной яме. Производная по времени функции Вигнера определяется её скобкой Моеля с гамильтонианом. Внутри ямы частица движется свободно и при вычислении скобки Моеля с гамильтонианом свободной частицы получаем дифференциальное уравнение, решение которого по времени можно представить как смещение координаты начальной функции Вигнера на $-pt/m$.

Однако стандартный подход решения задачи для свободной частицы с последующим наложением граничных условий не даёт правильного результата по той причине, что произведение волновых функций, определяющее функцию Вигнера, не локально. Поэтому, при некоторых значениях аргумента волновой функции наблюдается интерференция с областью пространства, где волновая функция должна обращаться в нуль.

Для получения решения, удовлетворяющего граничным условиям, волновая функция частицы была представлена, как произведение двух множителей. Первый множитель, зависящий от координаты и времени, соответствует волновой функции свободной частицы. Второй, зависящий только от координаты, — определяется граничными условиями и формой потенциальной ямы.

Если применить разделение волновой функции на две части, можно интерпретировать функцию Вигнера как Фурье образ от произведения этих двух частей и с помощью операции свёртки выразить её как произведение двух Фурье образов. Тогда в качестве решения уравнения движения получаем свёртку функции Вигнера в начальный момент времени со смещением координаты на $-pt/m$ и Фурье образа, независимого от времени функции и определяемого граничными условиями. Именно это преобразование позволило адекватно применить граничные условия.

В результате выполнения данной работы была найдена независимая от времени функция для частицы в одномерной потенциальной яме и двумерной потенциальной яме в виде прямоугольника, с которой необходимо провести операцию свёртки с функцией Вигнера свободной частицы. Также получено аналитическое решение уравнения динамики функции Вигнера.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства "Приоритет-2030" (Стратегический проект "Квантовый интернет").

Литература

1. A Concise Treatise on Quantum Mechanics in Phase Space // T. L. Curtright, C. K. Zachos, World Scientific Publishing, 2014
2. Phase space representation of quantum dynamics // A. Polkovnikov, Annals of Physics 325 (2010) 1790–1852

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КРИСТАЛЛОВ CdTe В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПРИМЕСНОГО СОСТАВА И ТЕМПЕРАТУРЫ

Коноплицкий В.В.^{1,2}, Волчков И.С.¹

ФНИЦ "Кристаллография и Фотоника" РАН, Москва, Россия, e-mail:

konoplizkii@mail.ru

²МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Технология создания солнечных батарей, использующая тонкие пленки на основе CdTe, бурно развивается и уже способна составить конкуренцию кремниевым батареям, при этом являясь более доступной и экологичной. И хотя фотоэлементы на основе кремния показывают превосходящие результаты, теоретический предел их эффективности не достигает 30%, что значительно ниже, чем 32,7% у фотоэлементов, созданных с использованием тонких пленок на основе CdTe.

Генерируемое такими фотоэлементами электричество складывается из фототока и термоэлектричества, возникающего при нагреве под прямым световым излучением. Цель представляемой работы - исследование генерируемого в кристаллах CdTe термоэлектричества и экспериментальное определение примесного состава этих кристаллов, в том числе избытка Cd или Te, дающих наибольший прирост термоэлектрических свойств.

В работе исследовались кристаллы CdTe, выращенные модифицированным методом Обреимова-Шубникова во ФНИЦ "Кристаллография и Фотоника" РАН. Образцы представляли собой тонкие пластины CdTe с нанесенным контактным слоем Au или Ga, для проведения электрических измерений. Исследовались термоэлектрические (такие как коэффициент Зеебека, термоэлектрической эффективности и сопротивления кристаллов от температуры) и электрические свойства (сила тока от напряжения и стабильность силы тока во времени) кристаллов CdTe, легированных Zn, Ni, Fe или Cl. Термоэлектрические свойства исследовались в диапазоне температур от 50 до 200 °С. Исследования проводились на установке СНТ 3-ОМЕГА (Россия). Для характеристики образцов проводились исследования элементного и примесного составов с помощью энергодисперсионной спектроскопии и масс-спектрометрии, исследования фазового состава с помощью рентгенофазового анализа, исследования параметров кристаллической решетки с помощью рентгеноструктурного анализа.

Было обнаружено, что кристаллы с составом, близким к стехиометрическому, обладают наименьшими термоэлектрическими свойствами, тогда как кристаллы, легированные Zn, Fe и Ni, и обладающие избытком Cd - показывают наилучший результат.

Литература

1. Павлюк М. Д. Детекторные кристаллы на основе CdTe и Cd_{1-x}Zn_xTe для прямого счета рентгеновских и гамма-квантов // дис. кан. физ.-мат. наук. М., 2020, С. 153.
2. Bosio A., Pasini S., Romeo N. The history of photovoltaics with emphasis on CdTe solar cells and modules // Coatings. – 2020. – V. 10. – №. 4. – p. 344.

МОНОСЛОЙ ТЕТРАОКСО[8]ЦИРКУЛЕНА КАК МАТЕРИАЛ-НАКОПИТЕЛЬ ВОДОРОДА: DFT МОДЕЛИРОВАНИЕ

Аникина Е. В.¹, Жилин М. С.², Бескачко В. П.³

¹ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)», г. Челябинск, Россия, anikinaev@susu.ru

²ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)», г. Челябинск, Россия, mishajilin@mail.ru

³ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)», г. Челябинск, Россия, beskachkovp@susu.ru

Активный поиск материалов для безопасных и компактных твердотельных водородных хранилищ ведется среди низкоразмерных структур с низкой плотностью. Двумерный полимер тетраоксо[8]циркулена (ТОС) обладает высокой удельной поверхностью и пористостью [1], что делает его многообещающим кандидатом в эффективные материалы-накопители водорода. Для оценки сорбционных характеристик этой структуры по отношению к водороду был смоделирован монослой ТОС с помощью программного пакета SIESTA [2], где используется теория функционала электронной плотности.

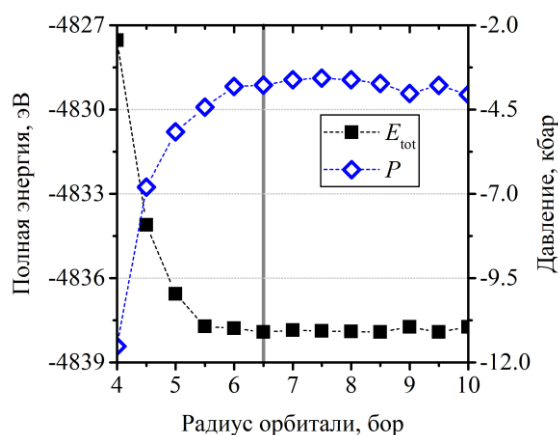


Рис. 1. Зависимость полной энергии системы и «давления» в ячейке (показывает, насколько далек текущий размер ячейки от равновесного) от радиуса обрезки C^{2p} орбитали.

Ячейка моделирования ТОС содержала 24 атома (20 – углерода, 4 – кислорода). Для всех элементов (C, O, H) использовался базис DZP, параметры которого оптимизировались. Пример оптимизации радиуса обрезки орбитали C^{2p} в приближении локальной электронной плотности приведен на рис. 1. Оптимальное значение радиуса, соответствующее установившимся значениям физических параметров, обозначено вертикальной серой прямой. Дисперсионные взаимодействия учитывались с помощью полуэмпирических поправок Гримме [3]. Равновесные размеры тетрагональной ячейки составили $8.41 \times 8.41 \times 40 \text{ \AA}^3$. С параметром разбиения прямого пространства MeshCutoff 400 Rb и разбиением обратного пространства на $9 \times 9 \times 1$ k -точек погрешность вычисления энергии связи водорода не превышала 5 мэВ. При оптимизации порог сходимости по силе составлял 1.3 мэВ/Å.

Для чистого монослоя ТОС наиболее устойчивой оказалась конфигурация молекулы H_2 в большой поре из атомов кислорода. При этом вычисленная энергия связи водорода не превышала 100 мэВ, что указывает на необходимость создания более активных центров сорбции на поверхности ТОС. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (государственное задание № FENU-2023-0011).

Литература

1. Begunovich L.V., Kuklin A.V., Baryshnikov G.V. *et al.* // *Nanoscale*. – 2021. – Vol. 13. – P. 4799-4811.
2. Soler J.M., Artacho E., Gale J.D. *et al.* // *J. Phys. Condens. Matter*. – 2002. – Vol. 14, Iss. 11. – P. 2745-2779.
3. Grimme S. // *J. Comput. Chem.* – 2006. – V. 27, Iss. 15. – P. 1787-1799.

ПОЛУЧЕНИЕ МЕТАЛЛ-ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ ПРОПУСКАНИЯ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ОРИЕНТАЦИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ

Загорский Д.Л.¹, Долуденко И.М.¹, Лаврова Н.А.¹, Панов Д.В.¹, Каневский В.М.¹,
Горохов Г. В.², Волюнец Н. И.², Поддубская О. Г.², Быченко Д. С.²

¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН (Москва)

²НИИ ядерных проблем БГУ (Минск)

Композитные материалы на основе наноразмерных ферромагнитных частиц, распределённых в диэлектрической матрице, представляют существенный интерес для применений микроволновой и терагерцовой оптики. В настоящей работе изучались плёнки металл-полимерного композита на основе трековых мембран — пористых полимерных плёнок. В поры мембран методом гальванического осаждения из раствора электролита были внедрены нанопроволоки (НП) из сплава $\text{Fe}_{0,2}\text{Ni}_{0,8}$ (пермаллой). Использовались два различных типа трековых мембран с порами диаметром 100 нм (ОИЯИ, г. Дубна): с «вертикальными» (строго перпендикулярными поверхности) и «разнонаклонными» порами (с углами разориентации $\pm 10\text{--}20^\circ$ в определённой плоскости). Плотности пор составляли $5 \cdot 10^8$ и $1,2 \cdot 10^9$ пор на см^2 , соответственно. СЭМ исследования НП, отделённых от матрицы после получения, показали, что их форма и ориентация соответствуют форме и ориентации пор в трековой матрице.

Измерение коэффициента пропускания T полученных образцов НП в матрице производилось с помощью терагерцового спектрометра TSPEC, использующего линейно поляризованное излучение в диапазоне 0,1–1 ТГц. Для исследования поляризационных зависимостей образец плёнки размещался на вращающейся платформе нормально к падающему излучению. Полученные для двух типов образцов частотная и угловая зависимости коэффициента пропускания приведены на Рис.1.

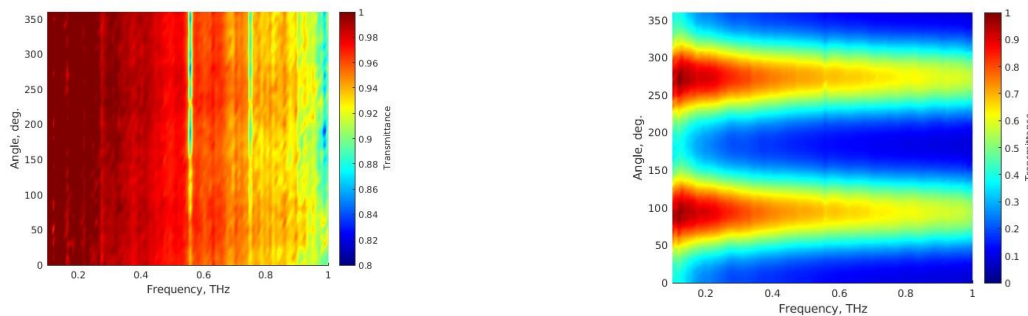


Рис.1 Зависимость коэффициента пропускания от частоты и ориентации падающего излучения (Слева для «вертикальных» НП, справа- для образца с «разнонаклонными» НП)

Видно, что коэффициент пропускания образца с вертикально ориентированными НП заметно зависит от частоты, но не от поляризации падающего излучения. Образец с НП, имеющими разброс углов ориентации (в одной плоскости) продемонстрировал сильную зависимость коэффициента пропускания от поляризации падающего излучения (достигающие 0.7 на частоте 1 ТГц). Таким образом, возникновение зависимости коэффициента пропускания от поляризации падающего излучения связано с наличием углового распределения пор в матрице. Направления поляризации в плёнке соответствуют преимущественным направлениям наклона НП.

Полученные результаты могут быть использованы для разработки тонкоплёночных элементов терагерцовой оптики: поляризаторов, фильтров и т.п.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Гранта РФФ 22-22-00983.

ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКИЕ ЖАРОСТОЙКИЕ ПОКРЫТИЯ ИЗ ХРОМА С НАНОАЛМАЗНЫМИ ЧАСТИЦАМИ ДЛЯ МНОГОСЛОЙНЫХ КОМПОЗИТОВ ИЗ Nb, Mo И ИХ СПЛАВОВ С УПРОЧНЕНИЕМ МЕЖСЛОЙНЫМИ ГРАНИЦАМИ

Коржов В. П.¹, Кийко В. М.¹, Петков В.²

¹Институт физики твёрдого тела РАН, г. Черноголовка, РФ

²Институт металловедения, оборудования и технологий с Центром гидро- и аэродинамики им. Академика Ангела Балева БАН, Болгария

korzhov@issp.ac.ru

Объектом нанесения жаростойких электролитических покрытий из хрома с наноалмазными частицами были многослойные стержни сечением $\sim 5 \times 5$ мм² и длиной 40–50 мм (рис. 1). Стержни нарезают из пластин, получаемых диффузионной сваркой многослойных пакетов из большого количества Nb- или Mo-фольг толщиной 30–40 мкм (рис. 2). Вместо Nb и Mo могли использоваться их деформируемые сплавы. Взамен ниобия – это, в первую очередь, могут быть (Nb–Ti)-сплавы с содержанием титана вплоть до 50%.

После сварки получались «монолитные» пластины с многослойными структурами из тонких, толщиной нескольких десятков микрон, Nb- или Mo-слоёв, или слоёв из их сплавов. Режим сварки пакетов: давление – 8,5 МПа, температура – от 1300 до 1500°C и продолжительность сварки – 20–30 мин.

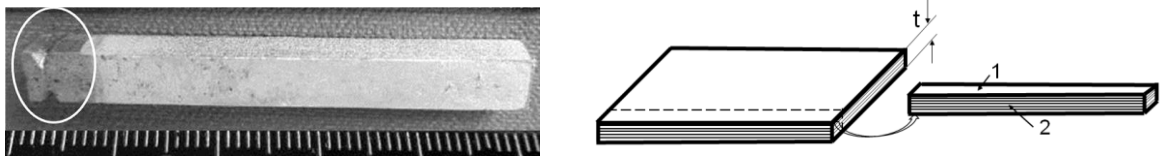


Рис. 1. Многослойный стержень квадратного сечения 5×5 мм

Рис. 2. Пакет из Nb- и Mo-фольг и отрезанный из него стержень (1 – верхняя, гладкая, и 2 – боковая, многослойная, его поверхности, t – толщина пакета)

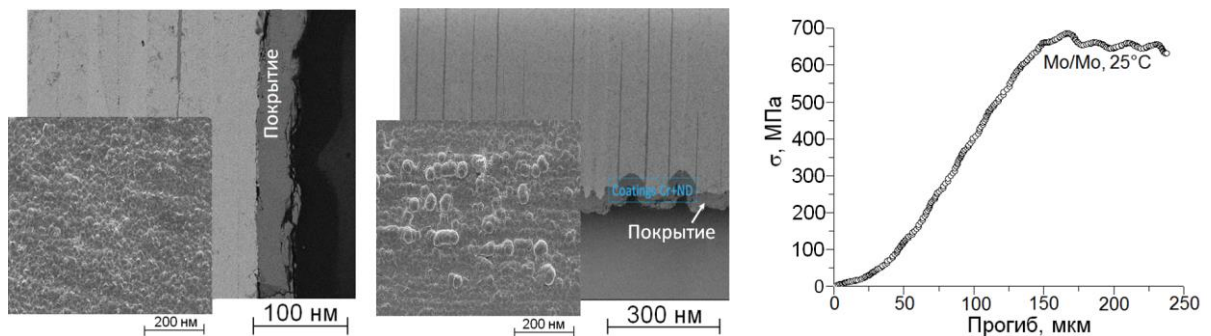


Рис. 3. Микроструктура поперечных сечений Mo/Mo-композита

Рис. 4. Зависимость нагрузка-прогиб при $\sim 20^\circ\text{C}$ Mo/Mo-композита без покрытия

На рис. 3 представлены микроструктуры многослойного сечения Mo/Mo-композита с плотными слоями покрытия толщиной 40–45 нм вдоль и поперёк его сечения. На отдельных вставках – микроструктуры поверхности покрытий с отличающимися морфологиями на гладкой (1) и многослойной (2, см. рис. 2) поверхностях композита.

Результаты прочностных испытаний при 20 и 1300°C (рис. 4): σ_m и $\sigma_{пц} = 711 \pm 26$ и 682 ± 29 МПа. Для сравнения – композит Mo/Al/Al₂O₃/Al/Mo, армированный волокнами сапфира: σ_m и $\sigma_{пц} = 915 \pm 44$ и 556 ± 35 МПа.

Благодарности за финансовую поддержку – Российскому Фонду Фундаментальных исследований проекта РФФИ 20-53-18002 и Болгарскому исследовательскому фонду в рамках Соглашения о международном сотрудничестве № КР-06-Russia / 18 от 15.12.2020.

РЕЗОНАНСНАЯ ФОТОЭМИССИЯ НА ОСНОВЕ ТЕОРИИ МНОГОКАНАЛЬНОГО МНОГОКРАТНОГО РАССЕЙЯНИЯ В ФОРМАЛИЗМЕ ФУНКЦИИ ГРИНА ПРЯМОГО ПРОСТРАНСТВА

Бедирханов Г. С.¹, Таранухина А. И.²

¹Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия, gbedirhanov@sfedu.ru

²Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия, aitaranukhina@sfedu.ru

В работе представлен новый метод описания из первых принципов процесса резонансной фотоэмиссии на основе теории многоканального многократного рассеяния в формализме функции Грина (ФГ) прямого пространства (MCMS-GF). Получено выражение для интенсивности резонансной фотоэмиссии (RPES) в терминах многоканальной функции Грина. Данный подход сочетает в себе идеи двух методов [1]: многократного рассеяния в формализме функции Грина (ФГ) и сильной связи каналов, позволяя учитывать в едином подходе не только одноэлектронные эффекты многократного рассеяния электронов в промежуточном и конечном состояниях процесса RPES, но также сильные электронные корреляции в этих состояниях.

Основным уравнением в предлагаемой схеме расчета является интегральное уравнение Дайсона для ФГ прямого пространства, связывающее функции Грина возмущенной и невозмущенной систем. В качестве ФГ невозмущенной системы выступает ФГ кристалла, рассчитанная в одноэлектронной версии многократного рассеяния, а оператор возмущения представляет собой ту часть взаимодействия, которая не была учтена в исходном приближении для ФГ, то есть электронные корреляции. В разработанном нами методе интегральное уравнение Дайсона сводится к системе алгебраических уравнений для многоканальной ФГ. Это достигается разложением ФГ по регулярным и нерегулярным решениям системы связанных интегро-дифференциальных уравнений, полученной применением вариационного принципа Кона к К-матрице реакции.

В качестве примера обсуждаются уравнения для интенсивности резонансной фотоэмиссии с 3p-уровня при энергиях фотонов, близких к порогу ионизации 2p-уровня в соединениях с формальной электронной конфигурацией (3d⁰).

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 21-521-15034.

Литература

1. A. Taranukhina, A. Novakovich, C.R. Natoli, O. Siper Multiple Scattering in Green's Function Formalism: Single-Channel and Multichannel Versions // in "Multiple Scattering Theory for Spectroscopies", ed. by D. Sébilleau, K. Hatada and H. Ebert, Springer Proceedings in Physics v. 204, 171-196, Springer (2018).

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ КОЭФФИЦИЕНТОВ ТЕНЗОРА УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ σ - ФАЗЫ Fe_8Mo_7

Васильев Д.А., Купавцев М.В.

*Институт Металлургии и Материаловедения им. А.А. Байкова РАН,
Москва, Россия, dvasilyev@imet.ac.ru*

σ - фаза Fe_8Mo_7 является одной из топологически плотноупакованных фаз (ТПФ), которые могут образовываться в ферритных сталях или суперсплавах в результате длительной эксплуатации изделий при высоких температурах и облучении. σ - фаза представляет собой соединение, выделение которого вызывает локальные напряжения матрицы и может инициировать разрыв и влиять на сопротивление ползучести, предел текучести и пластичность. Поэтому выделение σ - фазы необходимо тщательно контролировать.

Для решения этой задачи предпринята попытка расчета термодинамики σ - фазы системы Fe-Mo. Для этого были рассчитаны коэффициенты упругости C_{ij} тензора деформации Fe_8Mo_7 . C_{ij} рассчитывались через изменения полных энергий $\Delta E(\delta)$, представленных на Рис. 1. Изменения $\Delta E(\delta)$ зависят от приложенных деформаций δ соответствующих различным типам искажений D_i кристаллической решетки [1, 2]. В Табл. 1 приведены C_{ij} Fe_8Mo_7 , полученные с помощью квантово-механических расчетов.

Таблица 1.

Коэффициенты упругости C_{ij} тензора деформации (в ГПа) σ -фазы Fe_8Mo_7 , рассчитанные для основного состояния ($T = 0$ К).

Fe_8Mo_7	C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{33}	C_{44}	C_{66}
Fe_8Mo_7	420.6	144.0	129.0	464.4	78.8	110.9

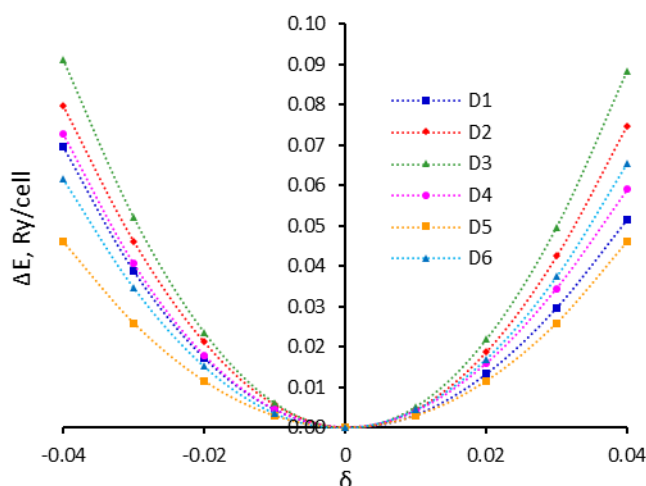


Рисунок 1. Кривые разностей полных энергий, ΔE , в зависимости от приложенных деформаций δ , возникающих при воздействии матриц искажений $D_1 - D_6$ [1, 2] на кристаллическую решетку σ - фазы Fe_8Mo_7 .

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-03-00530.

1. D. Vasilyev, A new method for calculating the thermodynamic and physical properties of compounds: Application to Laves phase Fe_2Mo , *Physica B: Condensed Matter* 621 (2021) 413307.
2. D. Vasilyev, First-Principles Calculations of Thermal Expansion Path of the Co_7Mo_6 μ -Phase, *Phys. Status Solidi B*, 260 (2023) 2200222.

КИНЕТИКА ОБРАЗОВАНИЯ И ДВИЖЕНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ

К.Д. Манухина, Д.С. Воронин, В.С. Красников, А.Е. Майер

Челябинский Государственный Университет, Челябинск, Россия

Исследование движения и кинетики образования дислокаций в металлах при динамическом деформировании необходимо для построения механических моделей, применимых к описанию интенсивных воздействий на металлы. При возрастании скорости деформации движущейся уединенной дислокации со скоростью, ограниченной звуковым барьером, может быть недостаточно для снятия сдвиговых напряжений в локальном объеме вещества. Это делает возможным переход дислокации в сверхзвуковой режим либо генерацию вторичных дислокаций.

В работе проведено молекулярно-динамическое (МД) исследование движения краевой дислокации в алюминии при помощи пакета LAMMPS [1] и межатомного потенциала [2]. Рассматривались скорости деформации от 1.7 до 6.7 нс⁻¹. Получено, что в случае скорости деформации выше 3.3 нс⁻¹ становится возможен переход дислокации в режим, когда ее скорость превосходит поперечную скорость звука в алюминии. Развитие пластической деформации сопровождалось образованием вторичных дислокаций в системе.

Результаты МД расчетов используются для калибровки модифицированного уравнения движения дислокации [3], учитывающего возможный сверхзвуковой режим. Для описания вводятся четыре параметра: поперечная и продольная скорости звука, масса покоя дислокации и пороговое значение напряжения для перехода на продольную скорость звука. Подбор параметров модели осуществляется с помощью байесовского подхода. Для подбора оптимальных параметров уравнения движения использовались 20 наборов МД данных. Максимум распределения соответствует оптимальным параметрам уравнения движения дислокации, которые определены равными $m = 2.99499 \cdot 10^{-17}$ (кг/м), $c_t = 3197.1$ (м/с), $c_l = 6861.72$ (м/с) и $S_{crit} = 1.94535$ ГПа.

Описание зарождения вторичных дислокаций в системе осуществляется, на основе подхода накопленной вероятности критической флуктуации, развитого в работе [4].

Работа выполнена за счёт гранта РФФ 18-71-10034.

Литература

1. S. Plimpton., A. Thompson., R. Shan., S. Moore., A. Kohlmeyer. // LAMMPS-ICMS Users Manual, <http://lammps.sandia.gov>, Sandia National Laboratories, 26 may 2016.
2. Apostol & Mishin AlCu ADP EAM. // Phys. Rev. B 83, 054116, 2011.
3. Khishchenko K.V., Mayer A.E. // International Journal of Mechanical Sciences (2021).
4. Latypov F.T., Mayer A.E., Krasnikov V.S. // International Journal of Mechanical Sciences (2020)

РАСЧЕТ НЕКОТОРЫХ ПАРАМЕТРОВ ДЕФОРМАЦИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТЕКОЛ ПРИ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОМ ДИНАМО- МЕХАНИЧЕСКОМ АНАЛИЗЕ

Федоров В. А., Березнер А.Д.

*Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина,
Тамбов, Россия*

fedorov-tsu.tmb@inbox.ru, qwert1009@mail.ru

В настоящее время, свойства аморфных сплавов (металлических стекол – МС) активно исследуются в металловедении, физике и других разделах науки и техники, с фундаментальных и прикладных позиций. При этом актуальным остается получение систематизированной модели поведения данного класса материалов в условиях наложения различных внешних воздействий, таких как нагрев, деформация и др. Немаловажным является нахождение опорных параметров, количественно характеризующих свойства исследуемой системы. В связи с этим, проводилось моделирование деформации ленточных аморфных сплавов состава $Al_{85}Y_8Ni_5Co_2$, с последующим расчетом удельной теплоемкости, коэффициента термического расширения, вязкости, упругих модулей и скорости линейного (продольного) распространения звука в рамках экспериментов по неизотермическому динамо-механическому анализу (ДМА).

При моделировании и расчете теплоемкости аморфной системы $Al_{85}Y_8Ni_5Co_2$ были оценены значения температуры стеклования и кристаллизации сплава, а также найдено уравнение, связывающее искомый параметр аморфного образца с его температурой и амплитудно-частотными характеристиками нагружения (при ДМА). Указанное соотношение позволяет моделировать деформационную динамику материала с учетом вариации скорости его нагрева и частоты нагружения. Сдвиг между тепловыми максимумами (на кривых дифференциально-сканирующей калориметрии) и пиками ДМА, наблюдаемый в литературе, также описывается посредством найденной зависимости. По данным деформации исследуемого МС возможна оценка значения коэффициента линейного термического расширения α и молярной теплоемкости $C_{\text{мол.}}$. Найденные расчетные соотношения согласуются с экспериментом и другими данными по аналогичной тематике исследований и составляют: $\alpha \sim 4 \cdot 10^{-6} - 6 \cdot 10^{-6}$ 1/К и $C_{\text{мол.}} \sim 60 - 180$ Дж/(моль·К).

Вывод и анализ реологического уравнения для исследуемого сплава позволяет идентифицировать вид его деформации («течения») как гибридный: на начальном этапе ленточный сплав демонстрирует бингамовское поведение, но с повышением температуры все активнее проявляются псевдопластические (неньютоновские) свойства. При этом расчетное значение вязкости МС согласуется, по порядку величины, с литературными данными, что также способствует объективной интерпретации влияния холодного прокатывания аморфного сплава $Al_{85}Y_8Ni_5Co_2$ на его структурную релаксацию (проявление β -пика на кривых ДМА). Знание аналитического вида деформационной зависимости и силы реакции образца позволяет выразить функцию продольной скорости звука в исследуемой среде, значение которой составляет $\sim 4,1$ км/с – в начале эксперимента, что также согласуется с данными других работ.

Работа поддержана Российским Научным Фондом (грант № 22-22-00226)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФFUЗИИ АТОМА МЕДИ НА ГРАФЕНЕ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Худяков С. В., Колесников С. В.

МГУ им. М.В. Ломоносова, физический ф-т, Москва, Россия, serhmsu@gmail.com

Создание упорядоченных систем нанокластеров является областью, в которой постоянно ведутся активные исследования. Важной причиной такой активности является все возрастающий спрос на элементную базу электронных устройств с минимально возможными физическими размерами. Нанокластеры могут обеспечить сверхмалые размеры, увеличение ёмкости и быстродействия устройств памяти, однако для их успешного применения в качестве квантовых точек [1] нужно, чтобы их плотность сочеталась с пространственной упорядоченностью. Здесь большие возможности видятся в использовании муаровых структур графена, лежащего на поверхности металлов. Показано, что напыление металла на такой графен приводит к созданию в углублениях муара нанокластеров, упорядоченных с большой точностью [2]. Для сокращения затрат на реальные эксперименты по напылению удобно предварительно использовать компьютерное моделирование, которое помогает выбрать оптимальные режимы экспериментов и предотвратить возможные ошибки. Первым этапом моделирования роста нанокластеров на муаровой структуре графена является исследование диффузии одиночного атома.

В нашей работе моделирование диффузии атома меди на графене проводилось методом молекулярной динамики с использованием цепочек термостатов Но́зе-Гувера. В качестве потенциала взаимодействия атомов углерода между собой применялся потенциал Терсоффа-Бреннера [3], для атомов меди – потенциал Росато-Жиллопа-Легранда [4], взаимодействие медь-графен задавалось модифицированным потенциалом Морзе [5].

Получены результаты моделирования диффузии одного атома меди на графене при наличии либо отсутствии подложки из меди (111) в случае низкой и комнатной температуры. Введен простой критерий термализации атома меди на графене, доказана его применимость для указанных температур. Вычислены значения средней длины и времени свободного пробега до наступления термализации, а также параметров равновесной диффузии после термализации. Найдены зависимости этих величин от полярного θ и азимутального φ углов падения атома меди на графен. Проанализирована вероятность отскоков атома меди от графена в зависимости от начальных углов падения и температуры графена.

Литература

1. Ziyu Lv, Yan Wang, Jingrui Chen, Junjie Wang, Ye Zhou, Su-Ting Han. Semiconductor Quantum Dots for Memories and Neuromorphic Computing Systems. *Chemical Reviews*. 2020. 120. 9. 3941–4006.
2. Xiaojie Liu, Yong Han, James W. Evans etc. Growth Morphology and Properties of Metals on Graphene. *Progress in Surface Science*. 2015. 90. 397–443.
3. Brenner D.W. Empirical Potential for Hydrocarbons for Use in Simulating the Chemical Vapor Deposition of Diamond Films. *Phys. Rev.* 1990. B 42, 9458.
4. Rosato V., Guillope M., Legrand B. Thermodynamical and Structural Properties of f.c.c. Transition Metals Using a Simple Tight-Binding Model, *Philosophical Magazine*. 1989. 59. 2321-2336.
5. Колесников С.В., Сидоренков А.В., Салецкий А.М. Моделирование взаимодействия графена с поверхностью меди с помощью модифицированного потенциала Морзе. *ПЖЭТФ*. 2020. № 2. С. 101-106.

АНИЗОТРОПИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ CdTe С РЕШЕТКОЙ ТИПА СФАЛЕРИТА

Подкур П. Л.¹, Волчков И. С.¹, Башлыков Н. А.², Кошелев И. О.¹,
Каневский В. М.¹

¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия. vverde85@yandex.ru

²ФГБОУВО «МИРЭА – Российский технологический университет», Москва, Россия

Развитие полупроводниковой техники обуславливает повышение уровня требований к конструкционным материалам. Теллурид кадмия является перспективным материалом для использования в различных областях, например, при изготовлении рентгеновских и гамма-детекторов, способных работать при комнатной температуре и при изготовлении фотоэлектропреобразователей. Для применения во всех указанных областях необходимо подвергать механической обработке для придания ему необходимой формы и/или качества поверхности. Не смотря на то, что структура CdTe относится к классу симметрии $-43m$, CdTe может оказаться свойственна анизотропия свойств по различным кристаллографическим направлениям, ввиду отсутствия центра симметрии указанного класса.

Исследуемые кристаллы CdTe выращены во ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН модифицированным методом Обреимова-Шубникова [1]. Образцам была придана форма параллелепипедов с размерами порядка 2x4x2 мм. Исследовалась твердость образцов с помощью нанотвердомера «НаноСкан 3D» (Тисснум) в интервале нагрузок на индентор от 10 мН до 70 мН. Расчет числа твердости проводился автоматически по стандартной методике [2]. Всего за одно измерение наносилось ~70 индентов, индентором служила алмазная пирамида Берковича. На одном образце исследовалась твердость двух поверхностей: одна была образована сколом по плоскости спайности (110), другая, параллельная ей, шлифовалась и полировалась алмазными порошками АСМ1/0. Глубина измерений до 2 мкм.

В результате проведенных исследований установлено, что твердость зависит от плоскости измерения, результаты измерений представлены на рисунке 1. Различия твердости обнаружены на образцах с лигатурой, у образца с составом, близким к стехиометрии, не обнаружено изменения твердости.

Работы выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

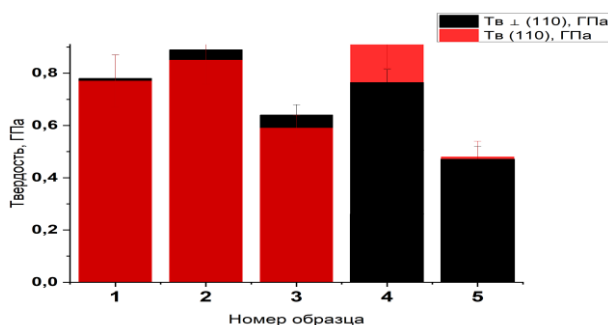


Рисунок 1. Результаты измерения твердости.

Литература

1. Ivanov Yu. M. // Russian Journal of Inorganic Chemistry. – 2015. – V.60. – P. 1816-1823.
2. Oliver W.C., Pharr G.M.// Journal of materials research. – 1992. – V. 7, Is. 6. – P. 1564-1583.

ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ ПРОТОНАМИ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ В КРИСТАЛЛАХ $Gd_3Al_2Ga_3O_{12}:Ce$ И $Gd_3Al_xGa_{5-x}O_{12}$ ($x=2, 3$)

Касимова В.М.¹, Козлова Н.С.¹, Забелина Е.В.¹, Бузанов О.А.², Лагов П.Б.^{1,3}, Павлов Ю.С.³, Кулевой Т.В.⁴, Столбунов В.С.⁴

¹НИТУ МИСИС, Москва, Россия, *kasimova.vm@misis.ru, kozlova_nina@mail.ru, zabelina.ev@misis.ru, lagov2000@mail.ru*

²АО «Фомос-Материалы», Москва, Россия, *buzanov@newpiezo.ru*

³Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, Россия, *rad05@bk.ru*

⁴НИЦ «Курчатовский институт» - Курчатовский комплекс теоретической и экспериментальной физики, Москва, Россия, *kulevoy@itep.ru, valeriy.stolbunov@itep.ru*

Кристаллы со структурой граната представляют собой хорошо известный тип смешанного кристалла, используемый, в том числе, в качестве матрицы для редкоземельных элементов. Широкие возможности изоморфного замещения катионов и легирования сделали гранаты очень перспективными и практически используемыми люминесцентными и сцинтилляционными материалами. Одним из таких функциональных материалов, способных к детектированию и преобразованию высокоэнергетического излучения, является $Gd_3Al_2Ga_3O_{12}:Ce^{3+}$ (GGAG:Ce). Кристаллы такого типа используются в физике высоких энергий, в досмотровых системах и в ядерной медицине [1]. Физические свойства GGAG:Ce в настоящее время изучаются различными группами исследователей. Одной из востребованных характеристик является реакция на облучение, которая может как ограничить области и условия применения GGAG:Ce, так и расширить возможности современной науки и медицины.

Фундаментальной проблемой является отсутствие модели дефектообразования в GGAG:Ce. Можно влиять на концентрацию групп дефектов, подвергая кристаллы послеростовым воздействиям (например, облучение высокоэнергетическими частицами). Дефекты влияют на все физические свойства кристаллов, а оптические свойства очень чувствительны к дефектам кристаллической структуры.

В связи с этим целью данной работы являлось облучение кристаллов $Gd_3Al_2Ga_3O_{12}:Ce^{3+}$ и $Gd_3Al_xGa_{5-x}O_{12}$ ($x=2, 3$) протонами для оценки влияния на оптические свойства и для создания или разрушения дефектных центров, чтобы приблизиться к происхождению природы дефектов в этих кристаллах.

Кристаллы были выращены в компании АО «Фомос-Материалы». Оптические свойства исследовались для всех кристаллов в исходном состоянии и после облучения протонами (на линейном ускорителе протонов И-2) на спектрофотометре «Cary-5000» с приставкой «УМА» в МУИЛ ППМиД «Монокристаллы и заготовки на их основе» НИТУ МИСИС.

Установлено влияние облучения протонами на оптические свойства и дефектную структуру всех исследуемых кристаллов, в частности нелегированных.

Благодарности.

Исследования проводились при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ВУЗам FSME-2023-0003.

Литература

1. Alenkov V., Buzanov O., Dosovitskiy G., Egorychev V., Fedorov A., Golutvin A., Guz Yu., Jacobsson R., Korjik M., Kozlov D., Mechinsky V., Schopper A., Semennikov A., Shatalov P., Shmanin E. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A. – 2019. – V.916. – P.226-229.

ЦИЛИНДРИЧЕСКОЕ ДИЛАТАЦИОННОЕ ВКЛЮЧЕНИЕ КОЛЬЦЕВОГО СЕЧЕНИЯ В БЕСКОНЕЧНОЙ СРЕДЕ

Гудкина Ж. В.^{1,2}, Гуткин М. Ю.^{2,3,4}, Красницкий С. А.^{2,3,4}

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия, gudkinazhanna@mail.ru

²Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

³Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

⁴Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

Исследование включений имеет большое значение для разработки современных материалов для аэрокосмической, морской, автомобильной и многих других областей применения [1]. Это связано с тем, что наличие включений в материалах влияет на их упругие поля в локальном и глобальном масштабе и, таким образом, значительно влияет на их механические и физические свойства. Большой интерес представляют включения необычной формы: тороидальные [2], усеченные сферические [3] и усеченные цилиндрические [4] включения.

В настоящей работе решается задача о нахождении полей напряжений дилатационного включения в виде бесконечного цилиндра в форме кольцевого сектора в упругой бесконечной среде. Решение найдено путем простого интегрирования решения для бесконечной дилатационной нити (т.е. прямой нити, подверженной трехмерной дилатационной собственной деформации [5]) по площади поперечного сечения включения.

Получены аналитические выражения для ненулевых компонент поля напряжений дилатационного включения в виде бесконечного цилиндра с поперечным сечением в форме кольцевого сектора в упругой бесконечной среде. Поля напряжений иллюстрируются картами напряжений. Выявлены и подробно обсуждены особенности в распределении напряжений. Показано, что величина напряжений может быть настолько велика, что могут активизироваться различные механизмы релаксации напряжений. Предложены наиболее вероятные механизмы релаксации напряжений через генерацию различных конфигураций дефектов.

Литература

1. Zhou K., Hoh H.J., Wang X., Keer L.M., Pang J.H., Song B. and Wang Q.J. // Mech. Mater. – 2013. – V. 60. – P. – 144-158.
2. Krasnitskii S., Trofimov A., Radi E., Sevostianov I. // Math.Mech.Solids. – 2019. – V. 24. – No 4. – P. 1129-1146.
3. Kolesnikova A.L., Gutkin M.Yu., Romanov A.E. // Int.J.Solids Struct. – 2018. – V. 143. – P. 59-72.
4. Glas F. // Phys.Status Solidi B. – 2003. – V. 237. – No 2. – P. 599-610.
5. Kolesnikova A.L., Soroka R.M., Romanov A.E. // Mater.Phys.Mech. – 2013. – V. 17. – No 1. – P. 71-91.

РОСТ И ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК CdTe, ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНО-ЛУЧЕВОЙ ЭПИТАКСИИ.

Кошелев И.О.¹, Резникова П.В.^{1,2}, Волчков И.С.¹, Подкур П.Л.¹, Каневский В.М.¹

¹Федеральный научно-исследовательский центр “Кристаллография и фотоника”

РАН, Москва, РФ

²ФГБОУВО «МИРЭА – Российский технологический университет», г. Москва, РФ

Теллурид кадмия – один из самых перспективных полупроводниковых материалов для детекторов рентгеновского излучения и тонкопленочных солнечных элементов. Эти применения возможны благодаря свойствам данного материала, таким как ширина запрещенной зоны (~1.45 эВ) и электрические свойства в широком диапазоне (~1–1·10⁹ Ом·см). [1] Молекулярно-лучевая эпитаксия (МЛЭ) является универсальной технологией эпитаксиального выращивания тонких пленок полупроводников, металлов и диэлектриков высокого совершенства [2]. МЛЭ представляет собой процесс эпитаксиального роста, в основе которого лежит взаимодействие одного или нескольких пучков атомов или молекул с кристаллической подложкой в условиях сверхвысокого вакуума.

Рост тонких пленок CdTe осуществлялся на лабораторной установке МЛЭ при температурах 600–800°C на источнике и ≈200°C на подложке по методике, описанной в [3]. Вакуум в процессе роста поддерживался не ниже 10⁻⁸ мбар. Нагрев подложки осуществлялся для лучшей адгезии распыляемого материала. Время роста: 90–210 мин. Исследования методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) производились на АСМ Solver Pro-M (NT-MDT, Россия) в контактном режиме. Рентгеновские исследования осуществлялись на рентгеновском порошковом дифрактометре X’Pert Pro MRD (PANalytical, Нидерланды) в геометрии Брэгга-Брентано, с медным излучением (Cu Kα=1,54 нм). Диапазон исследуемых углов 10–80°. Элементный состав по поверхности пленки проводился методом энерго-дисперсионной спектроскопии (EDX) на растровом электронном микроскопе JSM-6000Plus с ЭДС-приставкой (Jeol, Япония)

Исследовано влияние температурных условий и режимов роста на качество тонких пленок теллурида кадмия, полученных методом МЛЭ на сапфировых подложках С-ориентации. Установлено, что при температуре роста в 672°C, в результате наблюдается тонкая пленка высокого качества с однородной поверхностью. По результатам РФА анализа присутствует одна фаза, соответствующая фазе CdTe (111). При этом ЭДС анализ показал практически полную стехиометрию напыленных пленок (±0,1 ат. %). При увеличении скорости роста, путем увеличения температуры источника, качество пленки ухудшается, поверхность становится неоднородной, наблюдается ярко выраженная зернистость. При этом пик CdTe (111) смещается, в соответствии с правилом Вегарда, нарушается стехиометрия пленок.

Определены условия получения тонких пленок CdTe, обладающих наилучшими стехиометрией, структурой и качеством поверхности, что позволит использовать их в качестве элементов фотоэлектропреобразователей.

Работа проводилась с использованием оборудования ЦКП ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН по государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН

Литература

1. Кондрик А.И. // Функциональная микроэлектроника. 2004. № 6. С. 97–102.
2. Михайлов В.И., Буташинов А.В., Каневский В.М., Поляк Л.Е., Ракова Е.В., Муслимов А.В., Кварталов В.Б. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2011. 6. 97-102.

УПРУГИЕ СВОЙСТВА АМОРФНЫХ НАНОКОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Конюх Д. А.¹, Семенов А. А.¹, Бельтюков Я. М.¹

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия, conyuh.dmitrij@yandex.ru

Аморфные и полимерные нанокompозитные материалы вызывают большой интерес благодаря своим необычным физическим свойствам и рассматриваются как новые материалы для использования в различных областях человеческой деятельности. Как показывают экспериментальные исследования, такие вещества обладают улучшенными механическими, электрическими и термическими свойствами по сравнению с кристаллическими аналогами [1]. С одной стороны, уникальные свойства аморфных нанокompозитных материалов вызваны отсутствием порядка в расположении структурных элементов на микроскопическом уровне, а с другой — наличием в таких структурах наноразмерных включений.

Исследования показывают, что неупорядоченные вещества обладают масштабом корреляции структуры, который оценивается десятками межатомных расстояний. На этом масштабе неоднородности при приложении однородного внешнего воздействия в аморфной структуре проявляются неаффинные деформации, которые существенным образом влияют на упругость системы и делают однородную теорию упругости неприменимой [2]. Поскольку размер нановключений может быть сопоставим с масштабом неаффинных деформаций, ожидается существенное изменение упругих свойств аморфного нанокompозита. Экспериментально установлено, что добавление наноразмерных включений может сильнее влиять на макроскопические свойства нанокompозитов по сравнению с добавлением включений большего размера при той же объемной доле [3].

Для исследования локально неоднородных упругих свойств аморфных нанокompозитных материалов нами были применены методы молекулярной динамики и методы теории случайных матриц [4, 5, 6]. Проведенные с помощью этих методов исследования свидетельствуют, что в неупорядоченных структурах вокруг наночастицы образуется эффективная упругая оболочка с переходными упругими свойствами. Показано, что такое образование связано с беспорядком в системе. При этом толщина эффективной упругой оболочки сравнима с масштабом неоднородности структуры. Такая оболочка эффективно увеличивает объем наночастицы, что ведет к увеличению их влияния на макроскопические упругие свойства нанокompозитов. Наблюдается экспоненциальный спад упругих модулей вблизи жесткой наночастицы в зависимости от расстояния до нее. Аналогичное поведение упругих модулей наблюдалось и вблизи перехода между аморфными и кристаллическими слоистыми структурами комплексных материалов, что является проявлением неоднородности локальных деформаций.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-72-10083.

1. Paul D.R., Robeson L.M. // *Polymer*. – 2008. – V. 49. – P. 3187.
2. Leonforte F. et al. // *Physical Review B*. – 2005. – V. 72. – No. 22. – P. 224206.
3. Москалюк О.А. и др. // *ЖТФ*. – 2017. – Т. 87. – № 2. – С. 266-270.
4. Конюх Д.А., Бельтюков Я.М., Паршин Д.А. // *ФТТ*. – 2019. – Т. 61. – № 7. – С.1331-1335.
5. Семенов А.А., Конюх Д.А., Бельтюков Я.М. // *ФТТ*. – 2022. – Т. 64. – № 8. – С.1039-1045.
6. Beltukov Y.M., Conyuh D.A., Solov'yov I.A. // *Physical Review E*. – 2022. – V. 105. – No. 1. – P. L012501.

ЗАВИСИМОСТЬ СТРУКТУРНЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ $\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}$ НАНОПРОВОЛОК ОТ ИХ ДЛИНЫ

Хайретдинова Д. Р.^{1,2}, Долуденко И. М.¹, Волчков И.С.¹, Загорский Д. Л.¹, Панина Л. В.²

¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия, hairretdr@gmail.com

²НИТУ МИСИС, Москва, Россия

Ферромагнитные нанопроволоки (НП) являются интересным объектом для изучения из-за их уникальных магнитных свойств, обусловленных совокупностью кристаллографической анизотропии и анизотропии формы. Одним из доступных методов получения таких структур является матричный синтез в порах полимерных трековых мембран (ТМ), обеспечивающий возможность получения НП с заданными составом и аспектным отношением. Однако из-за особенностей электроосаждения металлов подгруппы железа, получение НП имеет ряд особенностей, которые влияют на их свойства.

В работе была изучена кинетика роста $\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}$ НП в процессе электрохимического синтеза в порах промышленных ТМ (ОИЯИ, г. Дубна) с диаметром пор 100 нм и плотностью пор $1,2 \cdot 10^9$ пор/см². Для получения структур использовались электролиты, содержащие ионы Fe^{2+} и Co^{2+} в различных пропорциях (% Fe^{2+} : 6; 43; 92). Для каждого состава была получена серия образцов с возрастающими временами осаждения (максимальное время соответствует времени максимального заполнения ТМ). Исследования полученных структур проводились методами растровой электронной микроскопии (РЭМ) с приставкой для энергодисперсионного анализа (ЭДС) (JEOL JSM6000+), рентгенофазового анализа (РФА) (RIGAKU Miniflex 600; PANalytical X'PERT Pro) и вибрационной магнитометрии (BM-07).

Результаты РЭМ показали, что длина НП всех составов нелинейно зависит от времени их роста. Также, из расчета теоретических длин НП и сравнения их с экспериментальными, был рассчитан процент заряда, участвующего в осаждении. В среднем он составлял 45–60%, что может быть объяснено как неоднородностью роста таких структур, так и выделением газообразного водорода в ходе реакции.

Методом РФА определялись параметры решетки для каждой длины НП, после чего проводился анализ элементного соотношения с помощью правила Вегарда. Было показано, что отношение элементов в НП отличается от отношения ионов Fe^{2+} и Co^{2+} в электролите, причем изменение имеет сложный нелинейный характер по всей длине НП с отклонением по железу в большую сторону, что может быть объяснено аномальным соосаждением железа. Данные по отношению Fe:Co также были проверены методом ЭДС и показали сходимость с расчетными значениями РФА.

Данные магнитометрии косвенно подтверждают заметное изменение состава НП в зависимости от их времени роста. Характер изменения петель гистерезиса указывает не только на изменение магнитной анизотропии формы и диполь-дипольного взаимодействия внутри массива, но также и на изменение кристаллической и доменной структур за счет изменения содержания Fe в составе НП.

Таким образом, изучение особенностей роста и структуры получаемых НП дает возможность получать наночастицы с заданными геометрическими параметрами и контролируемыми структурными и магнитными свойствами для различных применений.

Работа была выполнена в рамках государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН и на базе НИТУ МИСИС.

СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ - ДОМЕНЫ, ДЕФЕКТЫ, ПЕРЕКЛЮЧЕНИЕ

Е.Д. Якушкин

Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова, ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН, Москва, Россия, 119333, yakushkin@crys.ras.ru

Интерес к поведению диэлектриков и, в частности, сегнетоэлектриков, в магнитном поле возник после обнаружения в диамагнитных кристаллах эффекта магнитоупластичности (см. [1] и цитируемую там литературу). Этот эффект совместим с малостью магнитного взаимодействия по сравнению с тепловым фоном и имеет низкоэнергетическую, спиновую природу. Эффект обусловлен тем, что кулоновская сила в системе дислокация-стопор управляется магнитным полем через соответствующую электронную спиновую пару. При этом в эксперименте наблюдается изменение подвижности дислокаций в достаточно малых полях (≤ 1 Т). Важно, что образование спиновой пары не требует наличия парамагнитных примесей и, следовательно, эффект должен быть достаточно универсальным. Сегнетоэлектрические доменные стенки в определенном смысле подобны дислокациям, их движение при переключении также определяется стопорами - центрами пиннинга. Этими центрами пиннинга служат собственные дефекты кристалла, в том числе и дислокации. То есть, в сегнетоэлектриках можно было ожидать магнитостимулированных эффектов, подобных эффекту магнитоупластичности.

Действительно, в различных сегнетоэлектриках и сегнетоэластиках наблюдаются магнитостимулированные эффекты, связанные с воздействием магнитного поля на центры пиннинга доменных стенок [2-5]. В частности, было обнаружено значительное изменение параметров электрического переключения сегнетоэлектриков в магнитном поле.

Литература

1. Альшиц В.И., Даринская Е. В., и др. // УФН. - 2017. - Т. **187**. - С. 327.
2. Якушкин Е. Д. // Письма в ЖЭТФ. - 2014. - Т.99. - С. 483.
3. Якушкин Е. Д. // Письма в ЖЭТФ. - 2017. - Т.106. - С. 523.
4. Якушкин Е. Д., Сандлер В. А. // Письма в ЖЭТФ. - 2021. - Т.113. - С. 348.
5. Якушкин Е. Д. // Письма в ЖЭТФ. - 2023. - Т.117. - С. 598.

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА УГЛЕРОДНЫХ ТОЧЕК, СИНТЕЗИРОВАННЫХ НА ОСНОВЕ ЛАЗЕРНОГО КРАСИТЕЛЯ НИЛЬСКИЙ КРАСНЫЙ

Нельсон Д.К., Старухин А.Н., Курдюков Д.А., Еуров Д.А.
ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия, d.nelson@mail.ioffe.ru

Углеродные точки (УТ) являются новым типом люминофоров, свойства которых делают их перспективными материалами для оптоэлектроники, фотокатализа, биомедицины. Они представляют собой наночастицы турбостратного углерода размером до 10 нм, которые содержат различные функциональные группы, включающие атомы кислорода, водорода, азота, в существенной степени определяющие их физико-химические свойства. Изучение этих свойств и влияния на них различных факторов (технологии синтеза, состава окружающей среды) является актуальной задачей, направленной на понимание природы наблюдаемой люминесценции и управления ее характеристиками.

В настоящей работе приведены результаты исследования фотофизических свойств коллоидных растворов УТ, синтезированных на основе лазерного красителя оксазина-17 ("Нильский Красный"). Синтез проводился темплатным методом в нанопорах мезопористого кремнезема [1]. Средний размер полученных УТ составлял ~ 3.5 нм. Показано, что растворы УТ, подобно исходному красителю, демонстрируют яркий сольватofлуорохромный эффект – цвет и форма спектра флуоресценции (ФЛ) раствора зависят в определенных пределах от состава растворителя.

При комнатной температуре среднее время затухания ФЛ составляло 3 – 5 нс, что характерно для синглетных излучающих состояний. Показано, что при понижении температуры раствора до 80К наблюдается усиление ФЛ, при этом в спектре излучения УТ разгорается длинноволновая полоса, обусловленная излучением триплетного излучающего состояния. Величина синглет-триплетного расщепления составляет 0.46 эВ.

Изучена температурная зависимость интенсивности ФЛ раствора УТ в ряде растворителей в интервале температур 293К – 435К. Установлено, что интенсивность I ряда полос в спектре ФЛ УТ в глицерине демонстрирует нетривиальную температурную зависимость: при повышении температуры раствора тепловое тушение ФЛ в определенном температурном интервале сменяется ее усилением. Наблюдаемая температурная зависимость ФЛ $I(T)$ количественно описана в рамках трехуровневой модели, использованной ранее для описания температурной зависимости излучения полупроводниковых кристаллов [2]. В рамках модели оценены энергии безызлучательной дезактивации и активации излучающего состояния УТ. Обсуждается также возможное влияние водородных связей в системе УТ-растворитель на характер температурной зависимости ФЛ.

Литература

1. Курдюков Д.А., Еуров Д.А., Стовпяга Е.Ю., Кириленко Д.А., Коняхин С.В., Швидченко А.В., Голубев В.Г. // ФТТ. – 2016. – Т.58. – № 12. – С. 2454.
2. Shibata H. // Jpn. J. Appl. Phys. – 1998. – V. 37. – P. 550.

Эффективный потенциал Борна-Оппенгеймера джозефсоновского контакта, содержащего майорановские фермионы

Казак А. И.¹, Сеидов С.С.¹

¹НИТУ «МИСИС», Москва 119049, Россия, m2212291@edu.misis.ru

Рассмотрим джозефсоновский контакт, содержащий майорановские фермионы. Майорановские фермионы заданы анти коммутирующими эрмитовыми операторами: $\gamma_i = \gamma_i^\dagger, \{\gamma_i \gamma_j\} = 2\delta_{ij}$ откуда следует $\gamma_i^2 = 1$. Также между берегами джозефсоновского контакта может туннелировать куперовская пара.

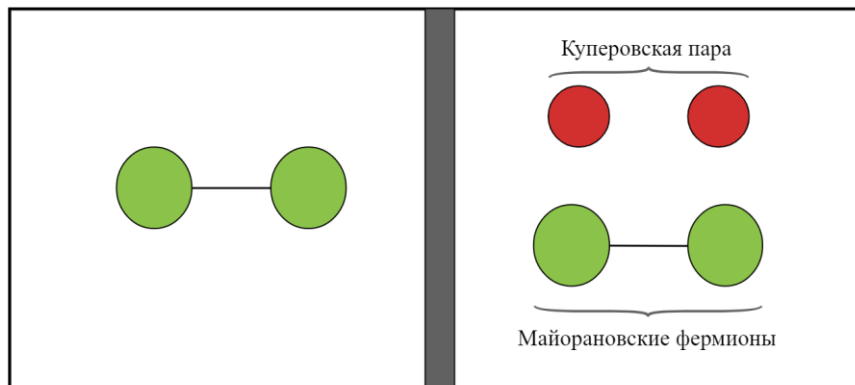


Рис. 1 - Джозефсоновский контакт с майорановскими фермионами.

Гамильтонова матрица кубита в базисе четырех состояний с самой низкой энергией:

$$H = \begin{pmatrix} E_C \left(n_g - \frac{1}{2} \right)^2 & 0 & E_J & -2iE_M \\ 0 & E_C \left(n_g - \frac{1}{2} \right)^2 & -2iE_M & E_J \\ E_J & 2iE_M & E_C \left(n_g + \frac{1}{2} \right)^2 & 0 \\ 2iE_M & E_J & 0 & E_C \left(n_g + \frac{1}{2} \right)^2 \end{pmatrix}$$

Теперь можно разложить гамильтониан в виде:

$$H = \sum C_{ij} (\sigma_i \otimes \sigma_j); \quad i, j \in x, y, z, e$$

Разложение гамильтониана позволяет, считая одну из подсистем (куперовские пары или майорановские фермионы) быстрой, а вторую медленной, получить эффективный потенциал в приближении Борна-Оппенгеймера путем усреднения динамики быстрой подсистемы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства "Приоритет-2030" (Стратегический проект "Квантовый интернет").

Литература

1. Coulomb stability of the 4π -periodic Josephson effect of Majorana fermions // B. van Heck, F. Hassler, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker Phys. Rev. B 84, 180502(R)

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА АТОМНОПОДОБНОГО БАЗИСА НА DFT МОДЕЛИРОВАНИЕ СОРБЦИИ ВОДОРОДА НА МОНОСЛОЕ C₂N

Бабайлова Д. В.¹, Аникина Е. В.²

¹ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)», г. Челябинск, Россия, babailovadv@gmail.com

²ФГАОУ ВО «ЮУрГУ (НИУ)», г. Челябинск, Россия, anikinaev@susu.ru

Теория функционала электронной плотности позволяет исследовать материалы без предварительных эмпирических знаний, но для получения точных результатов необходимо оптимизировать параметры моделирования, в том числе – конечный базисный набор, в котором представляется волновая функция системы. Для оценки влияния вида и размера базисного набора на энергетические и геометрические характеристики водородного комплекса (корректные значения которых необходимы для оценки перспективности материала как водородного хранилища) была смоделирована сорбция молекулы H₂ на монослой C₂N в пакете SIESTA [1].

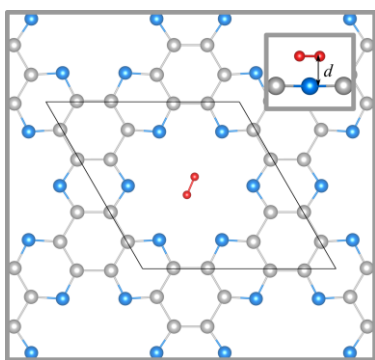


Рис. 1. Атомная структура системы C₂N+H₂. Атомы С, N и H – серые, голубые и красные, соответственно.

Гексагональная ячейка C₂N содержала 18 атомов. Для учета ван-дер-Ваальсовых взаимодействий использовались поправки Гримме [2] к приближению обобщенных градиентов. Использовался атомноподобный базис двух размеров: single- ζ (SZP) и double- ζ (DZP). Для каждого базиса была проведена оптимизация по процедуре, описанной в [3]. Параметр трансляции в плоскости монослоя составил 8.3-8.4 Å. Толщина вакуумной прослойки была не менее 35 Å. Разбиение обратного пространства на 7×7×1 *k*-точек, параметр разбиения прямого пространства MeshCutoff 360 Rb позволили вычислить энергию связи водорода с погрешностью ~5 мэВ. Порог сходимости силы при оптимизации геометрии – 1.3 мэВ/Å.

Моделировалась наиболее устойчивая конфигурация молекулы водорода – в большой поре C₂N из атомов азота (см. рис. 1) [4]. Энергия связи, E_{bind} , считалась с учетом поправки к ошибке суперпозиции базисного набора (BSSE), E_{CP} [3]. Результаты расчетов представлены в таблице 1.

Таблица 1. Сорбция молекулы H₂ в большой поре C₂N

Размер базиса	E_{bind} , мэВ	$ E_{\text{CP}} $, мэВ	d , Å	Конфигурация H ₂
SZP	-90	217	1.01	параллельно C ₂ N
DZP	-97	29	1.79	перпендикулярно C ₂ N

Если сравнить полученные результаты с плосковолновыми расчетами [4], где отсутствует BSSE, можно увидеть, что для получения корректных E_{bind} и конфигураций молекулы H₂, необходимо брать достаточно большой базис и учитывать E_{CP} .

Литература

1. Soler J.M., Artacho E., Gale J.D. *et al.* // J. Phys. Condens. Matter. – 2002. – Vol. 14, Iss. 11. – P. 2745-2779.
2. Grimme S. // J. Comput. Chem. – 2006. – V. 27, Iss. 15. – P. 1787-1799.
3. Anikina E.V., Beskachko V.P. // Bull. South Ural State Univ. Ser. “Mathematics. Mech. Physics.” – 2020. – V. 12, Iss. 1. – P. 55-62.
4. Anikina E., Naqvi S., Bae H. *et al.* // Int. J. Hydrogen Energy. – 2022. – V. 47, Iss. 19. – P. 10654.

НЕСТАЦИОНАРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ДЕФЕКТОВ С ГЛУБОКИМИ УРОВНЯМИ В AlGaAsSb/GaAs p-i-n ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

Солдатенков Ф. Ю.¹, Соболев М. М.²

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия, E-mail: f.soldatenkov@mail.ioffe.ru

²Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия, E-mail: m.sobolev@mail.ioffe.ru

Высоковольтные AlGaAsSb/GaAs p-i-n гетероэпитаксиальные структуры могут быть использованы в современной силовой электронике и импульсной технике для изготовления приборов повышенного быстродействия, способных работать при повышенных рабочих частотах повторения импульсов и температурах. Применение более широкозонных по сравнению с GaAs твердых растворов AlGaAs позволяет увеличить рабочие температуры приборов на их основе до 250°C, и выше [1]. Повысить быстродействие приборов удастся за счет контролируемого образования собственных структурных дефектов [2] при выращивании гетероструктур с заданным рассогласованием по параметру решетки с помощью введения Sb или In в GaAs [3] или AlGaAs.

В данной работе представлены результаты исследования вольт-фарадных характеристик и спектров нестационарной спектроскопии глубоких уровней (DLTS) высоковольтных плавных p^o-i-n^o -гетеропереходов $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}/GaAs$ (с максимальным содержанием x до 30% и y до 15 %). Одним из результатов исследования вольт-фарадных характеристик и спектров DLTS данных структур стало обнаружение в них глубоких уровней DX центра, которые могут определять время релаксации неравновесных носителей в $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ базовых слоях, а также его температурную зависимость. Следует отметить, что в исследованных структурах было выявлено отсутствие глубоких уровней, связанных с дислокациями, тогда как в DLTS-спектрах слоев $GaAs_ySb_{1-y}$ с y до 3% и, по всей видимости, с меньшей плотностью дислокаций, они присутствовали [3]. Это могло быть связано с изменением дислокационной структуры гетерослоев с увеличением рассогласования по параметру решетки слоя и подложки (то есть, при увеличении содержания Sb в слоях). Так, в работе [2] с помощью методов рентгеновской топографии мы выявили постепенную перестройку формы отдельных ячеек сетки дислокаций несоответствия при увеличении рассогласования в подобных гетероструктурах – форма ячеек с четкими прямыми границами изменялась до округлой, с последующей перестройкой в ячеистую дислокационную структуру с плотными границами ячеек и с характерными фигурами роста, объединяющими, как правило, сразу несколько дислокационных ячеек.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-00245, <https://rscf.ru/project/23-29-00245/>.

Литература

1. Sobolev M. M., Soldatenkov F. Yu., Danil`chenko V. G. // Journal of Applied Physics. – 2020. – V. 128 – № 9. P. – 095705.
2. И.Л. Шульпина, В.А. Козлов, Ф.Ю. Солдатенков. // Тез. докл. конф. "Рентгеновская оптика - 2014", 6-9 октября 2014, г. Черноголовка, стр. 55-57.
3. Sobolev M. M., Soldatenkov F. Yu., Shul'pina I. L. // Journal of Applied Physics. – 2018. – V. 123 – № 16. P. – 161588.

ЗЕРНОГРАНИЧНАЯ СЕГРЕГАЦИЯ ПРИМЕСИ КАК ИНСТРУМЕНТ ПОДАВЛЕНИЯ РОСТА ЗЁРЕН В ПОЛИКРИСТАЛЛЕ

Марчий Г.В.¹, Самсонов Д.С.¹

¹*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия,
georgiy.marchiy@mail.ioffe.ru*

Во многих случаях рост зёрен в поликристаллических материалах может быть нежелателен. Это касается как объёмных поликристаллов, где наноразмерные зёрна позволяют получать уникальные прочностные характеристики, так и тонких плёнок, где рост зёрен приводит к возникновению напряжений.

С точки зрения термодинамики рост зёрен обусловлен связанной с ними избыточной энергией, которую поликристалл уменьшает за счёт уменьшения доли границ зёрен, происходящего при увеличении их размера. Добавление в систему примеси, сегрегирующей в границах зёрен и уменьшающей их энергию, может сделать рост зёрен термодинамически невыгодным.

На данный момент широко распространены два подхода к моделированию зернограничной сегрегации, позволяющие предсказать эффект подавления роста зерен. В первом случае рассматривается система из зерна и однородной границы, в которых происходит растворение примеси, описываемое моделью регулярного твёрдого раствора [1]. Однако реальные границы зерен обладают сильной неоднородностью. М. Wagih и С. А. Schuh [2] предложили второй подход к построению термодинамической модели, позволяющий учесть неоднородность границ зёрен. Они показали, что учёт неоднородности существенно влияет на сегрегацию. Однако данный подход позволяет описывать только слабую сегрегацию, когда взаимодействие примесь-примесь в границах зёрен мало. Существуют системы, в которых такое взаимодействие играет существенную роль и им нельзя пренебречь. Особенно важно учитывать взаимодействие примесь-примесь в сильно несмешиваемых системах, таких как Ag-Ni, где сегрегация примеси конкурирует с кластеризацией.

В данном докладе показано, что в случае пренебрежения взаимодействием примесь-примесь сегрегация определяется только температурой, в то время как учёт примесного взаимодействия приводит к возникновению зависимости сегрегации от объёмной концентрации примеси. С помощью метода Молекулярной Динамики промоделирована сегрегация Ni в поликристалле Ag, рассчитаны параметры взаимодействия примесь-примесь. Показано, что учёт взаимодействия примесь-примесь играет ключевую роль в предсказании сегрегации атомов Ni, которая наблюдается в молекулярно-динамическом расчёте: без учёта примесного взаимодействия кластеризация была бы термодинамически выгоднее сегрегации, а значит не происходило бы подавления роста зёрен.

Литература

1. Trelewicz J.R., Schuh C.A. Grain boundary segregation and thermodynamically stable binary nanocrystalline alloys//Physical Review B, 2009, Vol. 79, No. 9, P. 094112.
2. Wagih M., Schuh C.A. Grain boundary segregation beyond the dilute limit: Separating the two contributions of site spectrality and solute interactions//Acta Materialia, 2020, Vol. 199, Grain boundary segregation beyond the dilute limit, P. 63-72.

ИЗМЕРЕНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЗАГОТОВОК ИЗ GAGG

**Пилюшко С. М.¹, Козлова Н. С.¹, Забелина Е. В.¹,
Касимова В. М.¹, Деев Г. Ю.¹, Бузанов О. А.²**

¹*Испытательная лаборатория «ИЛМЗ» НИТУ МИСИС, Москва, Россия,
vorpat2402@bk.ru, zabelina.ev@misis.ru*

²*АО «Фомос-Материалы», Москва, Россия, buzanov@newpiezo.ru*

В настоящее время сцинтилляторная оптика (детектирование ионизирующего излучения с разной энергией) является одним из перспективных направлений науки. В связи с этим, ведётся поиск новых материалов, способных преобразовывать высокоэнергетическое излучение в оптическое. Данное преобразование применяется, в частности, в ядерной медицине, для ранней диагностики онкологических заболеваний. Одним из сцинтилляционных материалов, разработанных не так давно, является гадолиний-алюминий-галлиевый гранат ($Gd_3Al_2Ga_3O_{12}$, GAGG), легированный церием ($Gd_3Al_2Ga_3O_{12}:Ce$, GAGG:Ce) [1]. На сцинтилляционные свойства кристаллов влияет их дефектная структура, которая также влияет на их оптические и электрофизические свойства. Дефектообразование в таких кристаллах исследовано слабо. Показано [2], что наблюдение собственных полос поглощения затрудняется в связи с наличием Ce. Это приводит к появлению на спектральных зависимостях пропускания интенсивных полос поглощения в УФ и видимой областях спектра. Типичной особенностью галлиевых гранатов является разупорядочение в катионной подрешетке [3]. В связи с этим необходимо исследовать свойства как легированных, так и нелегированных кристаллов с разным соотношением галлия к алюминию в катионной подрешетке. Электрофизические свойства таких кристаллов не изучены. В данной работе проводилось исследование электрофизических свойств образцов, изготовленных из монокристаллов $Gd_3Al_2Ga_3O_{12}$, $Gd_3Al_3Ga_2O_{12}$, $Gd_3Al_2Ga_3O_{12}:Ce$, выращенных на предприятии АО «Фомос-Материалы». Вышеперечисленные материалы являются диэлектриками с высоким сопротивлением по сходству с гранатами состава $Gd_3Ga_5O_{12}$, исследованием которых занимаются с 1970-х годов [4]. В связи с этим, для измерения электрофизических свойств кристаллов GAGG необходима измерительная установка, которая способна регистрировать токи вплоть до 10^{-15} А и достаточно высокие сопротивления до 10^{16} Ом [5]. В работе была протестирована высокотемпературная установка для измерения электрофизических параметров высокоомных диэлектриков на стандартных образцах, был осуществлён подбор оптимальных токопроводящих покрытий и получены первые результаты исследования электрофизических параметров образцов GAGG с разным соотношением галлия и алюминия.

Исследования проводились при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ВУЗам FSME-2023-0003.

Литература

1. K. Kamada, T. Yanagida, T. Endo, K. Tsutumi, Y. Usuki, M. Nikl, Y. Fujimoto, A. Yoshikawa // Valencia: IEEE NSS/MIC. – 2011. – p. 1927 – 1929.
2. В.М. Касимова, Н.С. Козлова, О.А. Бузанов, Е.В. Забелина, А.В. Таргонский, А.В. Рогачев // Неорганические материалы. – 2022. – Т. 58. – № 3. – С. 1–7.
3. А.А. Блистанов Кристаллы квантовой и нелинейной оптики.–М.: МИСиС, -2007.– 431 с.
4. L.F. Donaghey //J. Physics and Chemistry of Solids. – 1973. – LBL-2244, p. 1-23.
5. Г. Фрëлих Теория диэлектриков. Диэлектрическая проницаемость и диэлектрические потери: пер. с англ. - М.: Изд-во иностранной литературы. - 1960 - 251с.

СТУПЕНЬКИ ШАПИРО ПРИ СИНХРОНИЗАЦИИ ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ И АКУСТИЧЕСКИМИ КОЛЕБАНИЯМИ

Никитин М.В., Покровский В.Я., Кай Д.А., Зыбцев С.Г., Колесов В.В., Кашин В.В.
ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия, nikitin@cplire.ru

Волна зарядовой плотности (ВЗП) – коллективное состояние электронов (электронный кристалл), которое можно рассматривать как упругую среду, способную деформироваться и скользить при приложении электрического поля [1]. Недавно было обнаружено влияние динамической деформации кристалла на проводимость ВЗП в квазиодномерном проводнике TaS₃ [2]: наблюдалась синхронизация ВЗП – ступеньки Шапиро (СШ) – при возбуждении в образце механических вибраций на частотах до 1 МГц. Теоретический расчёт [3] подтвердил, что ультразвук или поверхностные акустические волны (ПАВ) могут индуцировать СШ при движении ВЗП.

В настоящей работе изучается возможность наблюдения СШ в нитевидных образцах квазиодномерных проводников при возбуждении в них динамической деформации с использованием: 1) пластин из ниобата лития, в которых возбуждались ПАВ, 2) кварцевого резонатора, и 3) пьезоактюаторов, между которыми подвешивались образцы [2]. Были исследованы соединения TaS₃ и NbS₃ II фазы.

При исследовании ВАХ вискероов, закреплённых на пластине из ниобата лития, обнаружено, что при возбуждении ПАВ (на частоте 42 МГц) наблюдается подавление порогового поля, а также особенности, имеющие вид СШ. Таким образом, можно заключить, что в режиме возбуждения ПАВ на ВАХ можно наблюдать эффекты синхронизации ВЗП.

В другом эксперименте механическое воздействие на образец осуществлялось с помощью стоячей акустической волны в кварцевом резонаторе. Образец NbS₃ длиной 85 мкм и шириной 800 нм был закреплён на пластине, в которой возбуждалась продольная мода на частоте 38.2 МГц. При этом воздействие на образец электрического поля снижается благодаря экранирующему слою металла между образцом и резонатором. Было обнаружено подавление порогового поля и СШ на частоте 19.5 МГц, заметно ниже резонансной.

На данный момент мы не можем однозначно различить воздействие на образец механической деформации и ВЧ электрического поля, возникающего в кварцевом резонаторе или ниобате лития. Согласно [3], различить СШ, вызванные ультразвуковыми и электрическими колебаниями, можно, сравнивая их амплитуды на различных гармониках: при воздействии ультразвука амплитуда *нечётных* СШ должна быть выше. В докладе планируется обсудить и другие отличия «механических» и «электрических» СШ. Так, в условиях наблюдения «электрических» СШ ВЧ электрическое поле существенно превышает постоянное, заставляя ВЗП двигаться поочерёдно то в одном направлении, то в противоположном. Воздействие же механических колебаний сводится к модуляции потенциала пиннинга и не может заставить ВЗП двигаться против постоянного поля.

Работа выполнена при поддержке РФФ, проект № 22-19-00783.

Литература

1. V. Ya. Pokrovskii, S. G. Zybtev, M. V. Nikitin, I. G. Gorlova, V. F. Nasretdinova, and S. V. Zaitsev-Zotov // *Uspekhi. Fiz. Nauk.* – 2013. – № 183, 33.
2. M.V. Nikitin, S.G. Zybtev, V.Ya. Pokrovskii and B.A. Loginov // *Appl. Phys. Lett.* – 2021. – № 118, 223105.
3. Michiyasu Mori and Sadamichi Maekawa // *Appl. Phys. Lett.* – 2023. – № 122, 042202.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СТРУКТУРЫ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНОГО AlNiCoFeCr СПЛАВА ЭКВИАТОМНОГО СОСТАВА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ И ТЕМПЕРАТУР

Меньшикова С. Г.¹, Димчева В. В.²

¹УдмФИЦ УрО РАН, г. Ижевск, Россия, svetlmenh@mail.ru

²УдГУ, г. Ижевск, Россия, valeriadimcheva@gmail.com

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) представляют собой особый класс многоэлементных сплавов с превосходным комплексом свойств, которые обуславливают широкие перспективы применения ВЭС в различных областях промышленности.

В работе исследовано: структура $\text{Al}_{20}\text{Ni}_{20}\text{Co}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Cr}_{20}$ сплава, полученного методом дуговой плавки; его стабильность; влияние высоких давлений (до 11 ГПа) при температуре закалки расплава 1950 К, добавок порошка гексагонального нитрида бора (BN) на его структуру и твердость (H_v) после закалки.

Исследования показали, исходный слиток имеет упаковку компонентами, соответствующей структуре B2 на основе искаженной ОЦК - решетки моноалюминид никеля NiAl с периодом решетки 0.2870 - 0.2883 нм и пространственной группой $R\bar{m}3m$ (однофазный твердый раствор замещения). H_v слитка высокая и составляет 5 ГПа. При нагреве слитка до 1950 К и последующем охлаждении со скоростью 1 град/с до комнатной температуры происходит частичный распад исходного твердого раствора; ячеистое выделение по границам зерен фаз с различной морфологией, типами структур и химическим составом. Все фазы обогащены несколькими элементами. Среднее значение H_v сплава уменьшается до 4.8 ГПа. В условиях термобарического воздействия (импульсное плавление и нагрев до 1950 К в камере типа «тороид» при постоянном высоком давлении 5 ГПа) происходит полный распад исходного твердого раствора. После охлаждения со скоростью 1000 град/с до комнатной температуры в структуре образца формируется дисперсная структура эвтектического типа. Четко выделяются отдельные фазы различной морфологии. Первоначально формируется фаза правильной геометрической формы (в сечении шестиугольники), обогащенная хромом (состав фазы: хром 60, железо 20, кобальт 14, никель 6 (ат.%)). Также в структуре присутствуют образования сложной геометрической формы, состоящие из нескольких фаз, вокруг которых формируется сложная эвтектика. Все формирующиеся фазы многокомпонентные, A1 или A2 типов. Среднее значение H_v немного выше, чем в исходном образце и составляет 5.5 ГПа. Увеличение давления до 11 ГПа при тех же условиях и введение в сплав небольшого количества порошка BN (10% от объема исследуемого образца) приводят к существенным изменениям в структуре сплава. Присутствуют дендриты, в междендритном пространстве, в основном, по границам дендритов расположена иглоподобная с ответвлениями фаза. Дендриты обогащены алюминием, в междендритном пространстве больше всего хрома. Иглоподобная фаза содержит бор, азот и все элементы сплава. В образце формируется смешанная структура A2 и B2 типов. Среднее значение H_v почти в 2.5 раза выше, чем в исходном образце и составляет 12.5 ГПа, что объясняется морфологическими особенностями структуры и наличием упрочняющего материала.

ВЭС, в частности, типа AlNiCoFeCr , имеют большой потенциал для использования в качестве жаропрочных материалов; покрытий, требующих высокой твердости и высокой износостойкости; а также коррозионноустойчивых прочных материалов.

Работа выполнена в рамках Проекта РНФ (№ 22-22-00674). Образцы под высоким давлением получены в ИФВД РАН, г. Москва, г. Троицк. Авторы выражают признательность д.ф.-м.н., Академику РАН Бражкину В.В. за оказанное содействие в получении образцов в камере типа «Тороид».

ВЛИЯНИЕ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА СПЛАВОВ АІ-ПМ-РЗМ, ВКЛЮЧАЯ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫЕ, ПРИ БЫСТРОМ ОХЛАЖДЕНИИ ИХ РАСПЛАВОВ

Меньшикова С. Г.^{1,2}, Бражкин В. В.³

¹УдмФИЦ УрО РАН, г. Ижевск, Россия, svetlensh@mail.ru

²УдГУ, г. Ижевск, Россия, svetlensh@mail.ru

³ИФВД РАН, г. Москва, г. Троицк, Россия, brazhkin@hppi.troitsk.ru

Прогресс в понимании процессов структурообразования, протекающих в расплавах типа АІ - ПМ - РЗМ (ПМ - переходный металл, РЗМ - редкоземельный металл) (80 - 90 ат.% АІ) в области эвтектики, а так же в изучении влияния экстремальных воздействий (высоких давления, температуры и скорости охлаждения) на процессы их затвердевания имеет высокую научную значимость и актуальность.

Цель работы - исследование возможности формирования новых фаз и изучение свойств сплавов на основе алюминия бинарных систем АІ - ПМ, АІ - РЗМ, а также многокомпонентных $Al_{87}Ni_{18}Y_5$, $Al_{86}Ni_2Co_6Gd_6$, $Al_{86}Ni_6Co_4Gd_2Tb_2$ и высокоэнтропийного $Al_{20}Ni_{20}Co_{20}Fe_{20}Cr_{20}$ сплавов при быстром затвердевании их высокотемпературных расплавов под высоким давлением.

Образцы получали в камере высокого давления типа «тороид». Температурный диапазон от ликвидуса до 2000 К, диапазон давлений от атмосферного до 11 ГПа. Схема эксперимента: установление давления → импульсный нагрев → выдержка при установленных давлении и температуре → быстрое охлаждение без сброса давления до комнатной температуры → уменьшение высокого давления до атмосферного. Скорость охлаждения ~ 1000 град/с. Нагрев и плавление осуществляется пропусканием переменного тока через образец. Ток подводами служат пуансоны высокого давления. Значение температуры рассчитывается на основе показаний тиристора (тока, пропускаемого через образец). Фазовый состав образцов определяется методом рентгеноструктурного анализа на установках Дрон - 6 в $Cu - K_{\alpha}$ и Дрон - 3 в $Co - K_{\alpha}$ монохроматическом излучении. Для определения химического, элементного состава, морфологии и размера структурных составляющих сплава используется система Quattro S - Сканирующий Электронный Микроскоп (СЭМ) со стандартным детектором DBS (детектор направленного обратного рассеяния) ABS/CBS. Измерения и расчет физико - механических характеристик исследуемых образцов проводится на комплексной системе измерений Nanotest 600.

При давлениях выше 7 ГПа и температурах порядка 2000 К в сплавах формируются новые метастабильные соединения, сохраняющиеся в течение длительного времени в нормальных условиях. В зависимости от режима получения меняются механизмы затвердевания расплавов, формируются аномально пересыщенные твердые растворы в сплавах. Образцы однородные, плотные, не обнаружено пор и усадочных раковин. Структура мелкодисперсная с высокими механическими свойствами.

Полученные в работе результаты показывают эффективность влияния экстремальных воздействий, а именно, сочетание высоких давлений, температур и быстрой закалки на структуру и свойства получаемых материалов.

Работа выполнена в рамках Проекта РНФ (№ 22-22-00674).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА СПЛАВА $Al_{90}Gd_{10}$, ПОЛУЧЕННОГО ПРИ БЫСТРОМ ОХЛАЖДЕНИИ РАСПЛАВА

Меньшикова С. Г.¹, Жуйкова А. С.²

¹УдмФИЦ УрО РАН, г. Ижевск, Россия, svetlmensh@mail.ru

²УдГУ, г. Ижевск, Россия, aanna1907@mail.ru

Сплавы Al - РЗМ обладают высокими конструкционными свойствами. Могут быть рассмотрены как потенциальные претенденты на использование в качестве высокорезистивных и энергосберегающих элементов. При концентрациях РЗМ менее 20% получают материалы в аморфно - нанокристаллическом состояниях [1]. В последнее время интенсивно исследуются структура и свойства сплавов этих систем.

Известно, что состояние расплава перед закалкой влияет на структуру и свойства сплавов [2]. Различные экстремальные воздействия, в частности, высокое давление (несколько ГПа) оказывают влияние на термодинамику и кинетику затвердевания расплава, приводя к разным изменениям в структуре сплавов. Прогресс в понимании процессов структурообразования, протекающих в стеклообразующих расплавах в области эвтектики, а так же в изучении влияния давления и скорости охлаждения на процессы затвердевания имеет высокую научную значимость и актуальность.

В выбранной системе Al - Gd рассматривается влияние высокого давления на формирование как стабильных, так и метастабильных фаз. Цель работы заключалась в исследовании микроструктуры, фазового состава и физико - механических свойств сплава состава $Al_{90}Gd_{10}$, полученного после баротермических воздействий.

Методами рентгеноструктурного анализа, оптической и электронной микроскопии исследованы микроструктура и объемные физико - механические свойства (твердость, приведенный модуль упругости, индекс пластичности, упругий параметр восстановления) образцов бинарного сплава $Al_{90}Gd_{10}$. Первую серию образцов получали при высоком давлении 10 ГПа быстрым охлаждением расплава со скоростью 1000 град/с, температура закалки 2000 К. Вторую - прессованием исходного образца при высоком давлении 10 ГПа без плавления.

Структура исходного образца представлена двумя равновесными фазами α - Al и Al_3Gd . По сравнению с исходным образцом микроструктура обеих серий образцов измельченная и уплотненная. В образцах без плавления, кроме фаз α - Al и Al_3Gd , обнаружена фаза, обогащенная гадолинием, с составом $Gd_{55}Al_{45}$, в образцах с плавлением - фаза состава $Al_{92}Gd_8$. Поученные фазы стабильны длительное время в нормальных условиях. Особенности морфологии структуры и изменения в фазовом составе образцов, полученных под высоким давлением, приводят к изменению физико-механических свойств исследованного сплава.

Работа выполнена в рамках Проекта РНФ (№ 22-22-00674). Образцы под высоким давлением получены в ИФВД РАН, г. Москва, г. Троицк. Авторы выражают признательность д.ф.-м.н., Академику РАН Бражкину В.В. за оказанное содействие в получении образцов в камере типа «Торойд».

Литература

1. Inoue I. // Prog. Mater. Sci. – 1998. – № 43. . p – 365-380.
2. Бродова И.Г., Попель П.С., Барбин Н.М., Ватолин Н.А. Расплавы как основа формирования структуры и свойств алюминиевых сплавов. УрО РАН, Екатеринбург. – 2005. – 369 с.

ДЕФЕКТЫ В h -BN: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗМЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ

Латыпов Р. М.¹, Созыкин С. А., Бескачко В. П.

Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), Челябинск, Россия, ¹latypovrm@susu.ru

Одной из ключевых проблем бурно развивающейся квантовой фотоники является создание источников одиночных фотонов (ИОФ). Предложен ряд способов ее решения - от ослабления лазерного луча до твердотельных платформ типа центров окраски в алмазе и полупроводниковых квантовых точек. В последнее время большие надежды на создание таких источников, работоспособных при комнатной температуре, связываются с двумерными слоистыми (ван-дер-ваальсовыми) материалами благодаря ряду их уникальных оптических и электронных свойств и возможностями создания в них ИОФ, интегрированных с периферийными структурами интегральных схем - резонаторами и волноводами в ИС [1, 2]. Хотя микроскопическое строение и электронная структура этих ИОФ до сих пор полностью не изучены, мало сомнений в том, что они связаны с точечными дефектами и их комплексами, например, в гексагональном нитриде бора (h -BN) таковыми, вероятно, являются дефекты $C_B V_N$, $N_B V_N$ и $O_B O_B V_N$ [3].

В поиске материалов для ИОФ важную роль играют методы первопринципного компьютерного моделирования (ПКМ), позволяющие если не найти лучший материал для ИОФ, то отсеять материалы явно непригодные для этой роли. В настоящем сообщении мы обращаем внимание на то обстоятельство, что в любой реализации ПКМ всегда рассматривается только небольшой фрагмент структуры материала, содержащий дефект, вследствие чего свойства дефекта зависят от размера фрагмента и условий на его границе – от размерных эффектов. Мы исследовали эту зависимость для фрагмента листа h -BN, содержащего дефекты, упомянутые выше. Моделирование проводилось в рамках теории функционала электронной плотности, реализованной в пакетах SIESTA и VASP в приближении обобщенных градиентов для обменно-корреляционного функционала. Рассматривались суперячейки различных размеров, от $n \times n = 3 \times 3$ (18 атомов) до 14×14 (392 атома), рассчитывались энергия образования дефектов, зонная структура и плотность электронных состояний.

Результаты расчётов в базисах атомноподобных функций (SIESTA) и плоских волн (VASP) качественно согласуются. Все рассмотренные дефекты продуцируют дополнительные уровни в запрещенной зоне, которые сужаются до ~ 1 мэВ, начиная с $n \geq 6$ (>72 атомов в суперячейке). Яснее всего роль размерных эффектов прослеживается на энергии образования дефектов. Эти энергии для дефекта $C_B V_N$ имеют порядок сотен мэВ и монотонно уменьшаются с ростом n , выходя на плато при $n \geq 10$ (>200 атомов в суперячейке). Можно считать, что начиная с таких размеров модели предсказываемые свойства дефекта как источника одиночных фотонов уже не зависят от произвола в выборе граничных условий.

Литература

1. Turunen M., Brotons-Gisbert M., Dai Y., Wang Y., Scerri E., Bonato C., Jöns D.K., Sun Z., Gerardot B.D. // Nature Reviews Physics. – 2022. – Т. 4. – №. 4. – С. 219-236.
2. Tran T.T., Bray K., Ford M.J., Toth M., Aharonovich I. // Nature nanotechnology. – 2016. – Т. 11. – №. 1. – С. 37-41.
3. Tawfik S.A., Ali S., Fronzi M., Kianinia M., Trong T., Stampfl C., Aharonovich I., Toth M., Ford M.J. // Nanoscale. – 2017. – Т. 9. – №. 36. – С. 13575-13582.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХРОМНЫХ ОКСИДОВ ВОЛЬФРАМА С АНИОННЫМ И КАТИОННЫМ ЛЕГИРОВАНИЕМ

Маликов И. Ф.^{1,2}, Лядов Н. М.¹, Тагиров Л. Р.¹

¹ Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН,
Казань, Россия

² Институт физики, Казанский федеральный университет, Казань, Россия
insaf_malikov@mail.ru

Оксид вольфрама WO_3 (WO_x) – один из известных катодных электрохромных материалов, оптическая плотность которого изменяется при интеркалировании ионами щелочных и щелочноземельных элементов, входящими в состав электролита электрохромной ячейки.

Электрохромные покрытия имеют перспективу применения в архитектурном остеклении, дизайне интерьеров, автомобильной промышленности. Ведется постоянная работа над улучшением характеристик электрохромных устройств: диапазоном затемнения, циклической стабильностью, временем переключения между затемненным и просветленным состояниями.

Легирование позволяет улучшать потребительские свойства электрохромных тонких пленок WO_{3-x} . В данной работе произведено анионное легирование азотом и катионное легирование молибденом. Методом реактивного магнетронного распыления металлических мишеней вольфрама и молибдена в смеси газов аргона, кислорода и азота были синтезированы серии тонкопленочных образцов. Морфология, структура, элементный состав и валентные состояния составляющих элементов охарактеризованы методами сканирующей электронной микроскопии, рентгеновской дифракции, энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Оптические свойства измерены с использованием спектрофотометрии пропускания и спектроскопической эллипсометрии.

Легирование азотом дает возможность влиять на проводимость, позволяя перераспределить падения напряжения в стеке анод/электролит/катод в пользу электролита. С увеличением легирования происходит увеличения доли нестехиометрического кислорода, несовершенство материала приводит к ускорению процессов окрасивания/обесцвечивания.

Легирование молибденом позволяет перераспределить поглощения света в сторону коротковолновой части для компенсации синей окраски WO_3 и смещение окраски в сторону ахроматической, что является необходимым требованием для практического применения.

Работа И.М., Н.Л. и Л.Т. была поддержана грантом РНФ, проект № 22-22-00980.

Литература

1. Granqvist C. G. Handbook of Inorganic Electrochromic Materials, second impression // Elsevier, Amsterdam, The Netherlands – 2002.
2. Zeb, S., Sun, G., Nie, Y., Xu, H., Cui, Y., & Jiang, X. // Materials Advances. – 2021. – Т. 2. – №. 21. – С. 6839-6884.
3. Маликов И.Ф., Лядов Н.М., Салахов М.Х., Тагиров Л.Р. // ЖТФ – 2023.

ВЛИЯНИЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОТЖИГА НА СВОЙСТВА СПИНОВОГО СВЕТОИЗЛУЧАЮЩЕГО ДИОДА

Крюков Р.Н., Дорохин М.В., Звонков Б.Н., Демина П.Б.

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия, kriukov.ruslan@yandex.ru

Слой разбавленного магнитного полупроводника GaMnAs является одной из самых изученных систем с точки зрения практического применения в качестве спинового инжектора в приборах спинтроники [1]. В такой системе часто возникают проблемы, связанные с многообразием химического состава и, как следствие, вариативностью магнитооптических и электрических свойств. Для оптимизации этих характеристик используется низкотемпературный отжиг (НТО), приводящий к улучшению параметров [2]. Существует вопрос о существовании связи между химическим составом и оптическими характеристиками. Для решения этой задачи в ходе исследований использовались рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС) и методика регистрации поляризации электролюминесценции.

В ходе работы исследовалась структура, представляющая собой прототип спинового светоизлучающего диода низкотемпературный (НТ) GaAs/ δ -Mn/GaAs/In_{0.13}Ga_{0.87}As/буферный слой GaAs/подложка-GaAs, выращенного по технологии, описанной в [3]. Слои GaAs/In_{0.13}Ga_{0.87}As/буферный слой GaAs были выращены методом МОС ГФЭ. Слои НТ-GaAs/ δ -Mn/ были получены с использованием импульсного лазерного осаждения в том же реакторе. Это использовалось для минимизации сегрегационных процессов Mn и In. После перемещения полученных образцов в аналитический вакуумный объем три образца, предварительно выдержанных в условиях вакуума (10^{-9} Торр), подвергались НТО при 192°C, 300°C и 380°C в вакууме в течение 5 часов. Один образец не отжигался. Протокол исследований методом РФЭС и методика анализа данных представлены в [4]. Для оценки магнитооптических свойств структуры производились измерения поляризации излучения с использованием схемы эксперимента подробно описанной в [4].

Установлено, что профили распределения химических элементов в слоях, выращенных методом МОС ГФЭ, не претерпели каких-либо явных изменений. В δ -слое Mn определено, что в системе присутствуют различные сорта атомов Mn: элементный Mn⁰, замещающий атомы Ga Mn_{Ga} и MnAs. Отжиг провоцирует увеличение концентрации MnAs за счет сокращения количества Mn_{Ga}. Увеличение температуры отжига усиливает этот эффект. Стоит отметить, что отжиг не изменяет количество Mn⁰, что косвенно указывает на то, что это металлические кластеры. Отжиг влияет на состав покровного слоя НТ-GaAs, что проявляется в обогащении гетерограницы НТ-GaAs/ δ -Mn атомами As. Такие изменения в составе приводят к снижению степени поляризации электролюминесценции.

Работа была выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ МК-265.2022.1.2.

Литература

1. Puebla J., Kim J., Kondou K., Otani Y. // *Comm. Materials*. – 2020. – Т. 1. – 24.
2. Riahi H., Ouerghui W., Thevenard L., Gourdon C., Maaref M.A., Lemaitre A., Mauguin O., Testelin C. // *J. of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2013. – Т. 342. – С. 149 – 151.
3. Дорохин М.В., Зайцев С.В., Бричкин А.С., Вихрова О.В., Данилов Ю.А., Звонков Б.Н., Кулаковский В.Д., Прокофьева М.М., Шолина А.Е.// *ФТТ*. – 2010. – Т.52.– №11. – С. 2147–2152.
4. Boryakov A.V., Surodin S.I., Kryukov R.N., Nikolichev D.E., Zubkov S.Yu. // *J. of Electron Spect. and Related Phenomena*. – 2018. – Т.50. – № 11. – С. 1443–1448.

ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ АНИЗОТРОПИИ НА ДОМЕННУЮ СТРУКТУРУ МАГНЕТИКОВ

Мишурина Т. Р., Синкевич А. И., Дунаева Г. Г., Карпенков А. Ю.,
Семенова Е. М.

Тверской государственный университет, Тверь, Россия, semenova_e_m@mail.ru

На поверхности магнетиков формируется доменная структура (ДС), минимизирующая энергию полей рассеяния. В работе представлены результаты экспериментальных исследований ДС магнетиков с разным значением фактора качества Q и типом магнитокристаллической анизотропии. Домены в объеме одноосных кристаллов образуют полосовую структуру, ориентированную вдоль оси легкого намагничивания, а в сечении базисной плоскости формируются дополнительные домены в форме «звездочек», обладающих самоподобием. В представленном исследовании показано, что при выявлении ДС поверхности магнетиков нужно учитывать возможность формирования напряженного поверхностного слоя при подготовке металлографических шлифов. На рис.1 представлены изображения доменов, выявленные на призматической (TbFe_9Ti) и базисной ($\text{DyFe}_{11}\text{Ti}$ и $\text{Y}_2(\text{Fe}_{0.03}\text{Co}_{0.97})_{17}$) поверхностях образцов интерметаллидов сразу после полировки шлифа и через некоторое время. Показано, что ДС, которая выявляется на поверхности после полировки, является неравновесной и трансформируется с течением времени к стабильной в заданных условиях конфигурации. Длительность релаксационного процесса зависит от степени воздействия на поверхность и от температуры, при которой протекает этот процесс. Нагрев существенно сокращает время релаксации. В работе обсуждается механизм формирования поверхностной ДС в условиях наведенной поверхностной анизотропии, а также природа релаксационного процесса.

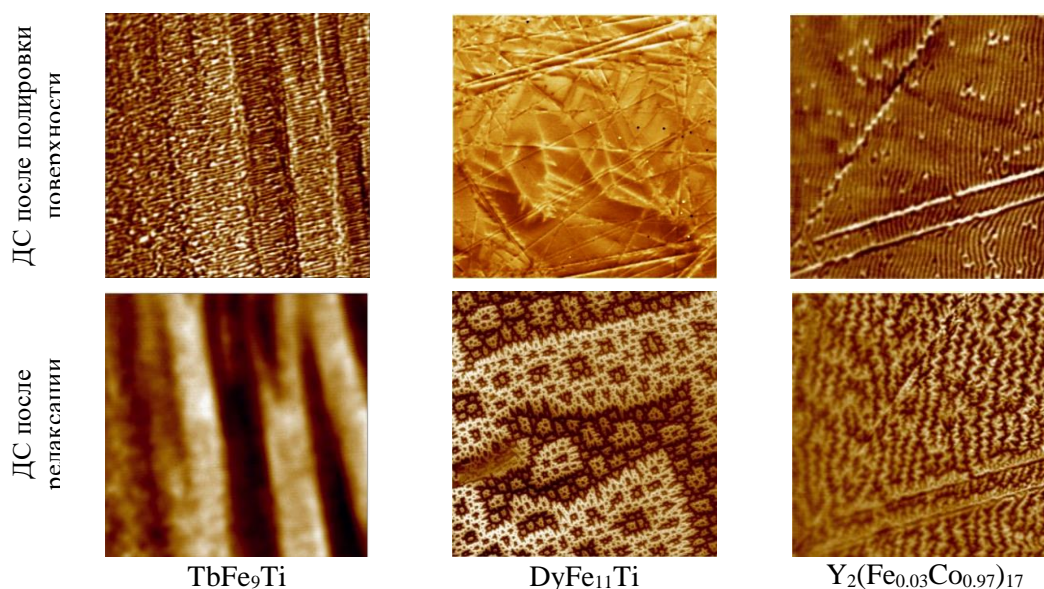


Рис.1. Доменная структура поверхности соединений редкоземельных интерметаллидов, выявленная методом магнитно-силовой микроскопии на поверхности.

Исследования выполнены при поддержке Минобрнауки РФ в рамках выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № 0817-2023-0006).

СЛИЯНИЕ КАПЕЛЬ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА В ИЗОТРОПНОЙ ЖИДКОСТИ И КАПЕЛЬ ЖИДКОСТИ В ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ

Бакланова К. Д.^{1,2}, Спириденко Н. А.¹, Долганов П. В.¹

¹*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия,
pauldol@issp.ac.ru*

²*Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, Москва,
Россия*

Слияние капель и разрушение (распад) струй жидкости – явления, распространенные в повседневной жизни, существенные для большого числа технологических приложений [1,2]. Слияние и разрыв в анизотропной среде обладают рядом нетривиальных особенностей, представляют интерес для физики частично упорядоченных конденсированных сред.

В докладе приводятся результаты исследований слияния капель жидкого кристалла в окружении изотропной жидкости и изотропной жидкости в окружении жидкого кристалла в тонких оптических ячейках [3,4]. Эксперименты проведены на нематическом и холестерическом (хиральном нематическом) жидком кристалле. В работе использована высокоразрешающая поляризованная оптическая микроскопия и высокоскоростная видеосъемка. Определены временные зависимости геометрических параметров капель при слиянии, в частности, зависимость от времени размера перешейка между каплями. Наблюдалось несколько режимов трансформации формы капель. Ранние этапы характеризуются степенными зависимостями ширины перешейка от времени. На заключительном этапе происходит релаксация капли к равновесной форме по экспоненциальному закону. Обнаружена неустойчивость перешейка, разделяющего капли, аналогичная неустойчивости Рэлея-Плато. Неустойчивость приводит к нескольким последовательным разрывам перешейка с образованием каскада сателлитных капель. Сопоставляются результаты в образцах различной толщины, с различными граничными условиями на поверхности.

Литература

1. Eggers J. // *Rev. Mod. Phys.* – 1997. – Vol. 69 – № 3. P. – 865-929.
2. Paulsen J.D., Burton J.C., Nagel S.R. // *Phys. Rev. Lett.* – 2011. – Vol. 106 – № 11. P. – 114501.
3. Dolganov P.V., Zverev A.S., Baklanova K.D., Dolganov V.K. // *Phys. Rev. E.* – 2021. – Vol. 104. – № 1. P. – 014702.
4. Dolganov P.V., Zverev A.S., Baklanova K.D., Dolganov V.K. // *Soft Matter.* – 2022. – Vol. 18. – № 1. P. – 126.

ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВЫ СТРУКТУРЫ: ИЗГОТОВЛЕНИЕ И ТЕСТОВЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ

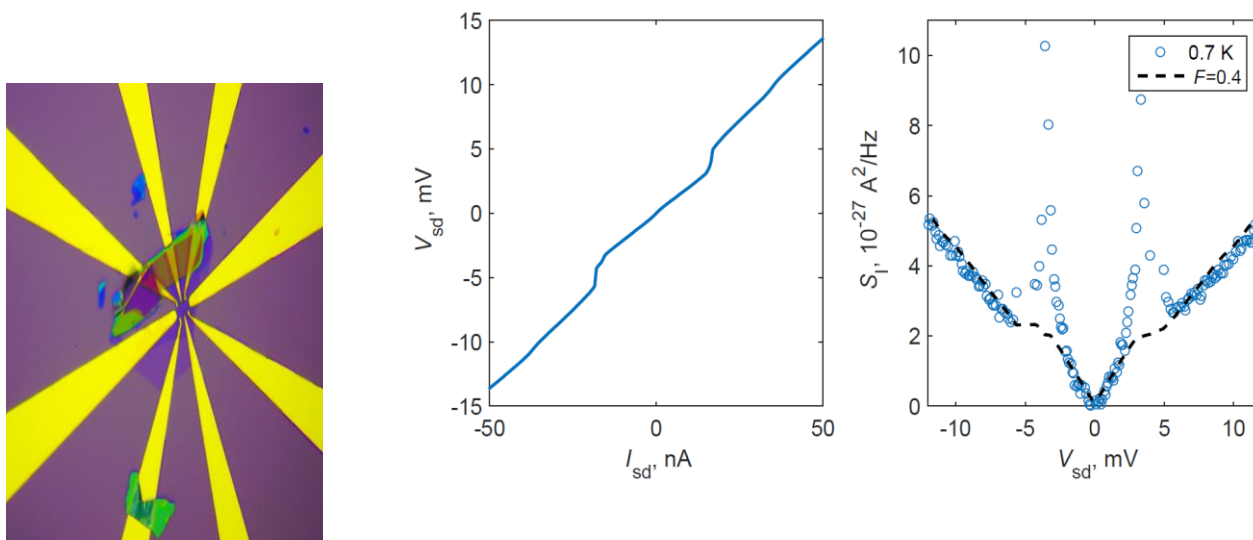
Прокудина М.Г., Тихонов Е.С., Шевчук А.Ф.

Институт Физики Твёрдого Тела РАН,
г. Черноголовка, prok@issp.ac.ru

Исследование графена, нитрида бора и других двумерных материалов крайне востребованы и являются одним из ведущих направлений физики конденсированного состояния. Ван-дер-Ваальсовы структуры получаются посредством послойного формирования в стек различных двумерных материалов. При этом флейки получают методом механической эксфолиации, и их перемещение осуществляется с помощью полимеров PDMS и PPC.

Нами были нацелены флейки сверхпроводящих материалов NbSe_2 и BSCCO и дихалькогенида переходных металлов WTe_2 , каждый из которых имеет свою особенность, усложняющую получение тонкого слоя. Воздействие органической химии при изготовлении контактов к материалу может приводить к потере проводящих свойств, поэтому структуры переносились на заранее изготовленные контакты на поверхности SiO_2 и в некоторых случаях покрывались сверху нитридом бора. Для образцов из каждого материала проводились тестовые измерения: при температуре 4.2К и 0.5-0.7К снимались вольт-амперные характеристики и осуществлялись шумовые измерения.

На рисунке для примера показано изображение образца BSCCO в оптическом микроскопе, приведены ее ВАХ и спектральная плотность дробового шума как функция тянущего напряжения.



Работа профинансирована в рамках выполнения гранта РФФ 18-72-10135.

ЗАВИСИМОСТЬ МИКРОСТРУКТУРЫ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ КОЛОНИЙ В СПЛАВАХ СИСТЕМЫ Nb-Mo-C ОТ СОСТАВА

Тлустенко А.С.¹, Гнесин И.Б.¹, Прохоров Д.В.¹, Карпов М.И.¹, Некрасов А.Н.²

¹Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук (ИФТТ РАН), 142432 Черноголовка, Россия, e-mail: tlustal@issp.ac.ru

²Институт экспериментальной минералогии имени академика Д.С. Коржинского Российской академии наук (ИЭМ РАН), 142432 Черноголовка, Россия

Необходимость разработки новых жаропрочных сплавов вызвана необходимостью в повышении технических характеристик современной авиационной и космической техники, а также наземных, воздушных и надводных энергетических установок. В качестве конструкционных материалов в высокотемпературной технике используются однофазные сплавы на основе ниобия и молибдена. Их серьезным недостатком является существенная потеря прочности при температурах свыше 1000 °С. Большое количество работ было посвящено изучению возможностей композиционных материалов на основе сплавов Nb-Si и Mo-Si-B, однако потенциал их жаропрочности ограничен уровнем температуры около 1300 °С, после преодоления данного порога эффективность упрочнения силицидными фазами резко падает. Сплавы системы Nb-Mo-C перспективны для изучения в качестве жаропрочных материалов, поскольку имеют высокую прочность, а также сохраняют прочностные характеристики при высоких температурах.

В работе были исследованы образцы сплавов системы Nb-Mo-C, содержащие 15 ат.% С, но различающиеся соотношением атомных концентраций Mo/Nb, от 0 до 0,33. Слитки образцов были получены с помощью электронно-лучевой зонной плавки. Из них путем резки и полировки были приготовлены образцы для исследования микроструктуры, проведенного с помощью оптической и сканирующей электронной микроскопии. Для анализа параметров микроструктуры использовали стереометрические методы [1].

В результате проведенных экспериментов было установлено, что исследованные сплавы являются двухфазными: в их микроструктуре наблюдаются первичные карбидные кристаллы и эвтектические колонии. Были экспериментально определены абсолютные удельные поверхности межфазных границ в эвтектических колониях. Для сплавов с соотношением Mo/Nb 0, 0,05, 0,15 и 0,33 они составили около 600, 1500, 2700, 3300 мм⁻¹ соответственно. Значения объемных долей фаз в эвтектических колониях составили 17, 22, 27 и 29%, для тех же сплавов, соответственно. Таким образом, значения относительной удельной поверхности межфазных границ в пределах эвтектических колоний составили около 3500, 6800, 10000 и 11400 мм⁻¹ соответственно. Полученные данные показывают, что рост содержания молибдена в сплавах приводит к значительному росту дисперсности карбидных частиц в эвтектических колониях. Это важный результат, демонстрирующий зависимость количественных характеристик микроструктуры данных сплавов от их химического состава. Для определения связи этих параметров с прочностными характеристиками материала необходимы дополнительные исследования.

Литература

1. Салтыков С.А. Стереометрическая металлография. Москва. Металлургия. - 1975.

СТРАТЕГИИ ПОВЫШЕНИЯ КВАНТОВОГО ВЫХОДА ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ НАНОРАЗМЕРНЫХ ОКСИДНЫХ ЛЮМИНОФОРОВ НА ПРИМЕРЕ $Y_2O_3:Eu^{3+}$

Нашивочников А.А., Костюков А.И.

*Новосибирский национальный исследовательский государственный университет,
Новосибирск, Россия, mataiassaiatam17@gmail.com*

Повсеместное использование оптических источников излучения стимулирует активное развитие люминесцентных материалов для различных приложений. В последнее время значительное внимание исследователей направлено на разработку наноразмерных люминофоров, поскольку наночастицы способны обеспечить существенно более высокое пространственное разрешение в оптических устройствах по сравнению с их аналогами микронного размера. Однако широкому распространению нанолюминофоров препятствует низкая эффективность их люминесценции. По этой причине разработка высокоэффективных наноразмерных люминофоров до сих пор остается крайне актуальной задачей.

В данной работе было разработано несколько стратегий для достижения высокой эффективности фотолюминесценции красного нанолюминофора на основе оксида иттрия, легированного европием ($Y_2O_3:Eu^{3+}$), с размером частиц около 20-25 нм. Для получения нанопорошков использовался метод лазерного испарения с помощью непрерывного CO_2 -лазера. Приготовленные образцы были охарактеризованы РФА, СЭМ, ПЭМВР, РФЭС, ЭСДО, ИК-, ФЛ-спектроскопией и другими физико-химическими методами.

Первый способ заключается в создании кислородобогащенной среды во время лазерного синтеза. Изучено влияние добавки от 10 до 40 об.% O_2 во время приготовления $Y_2O_3:Eu^{3+}$ на его свойства. В результате было установлено, что добавление 30 об.% O_2 во время синтеза приводит к увеличению квантового выхода ФЛ с 3% до 53% при сохранении размера частиц.

Второй способ оптимизации основан на отжиге синтезированных наночастиц в оптимальных условиях. Для определения данных условий было изучено влияние длительности, температуры и среды отжига на структурные и люминесцентные свойства $Y_2O_3:Eu^{3+}$. Было показано, что максимальный эффект наблюдается во время отжига на воздухе при температуре 750 °С в течение 2 ч. В результате был достигнут квантовый выход 61%, однако отжиг сопровождается укрупнением частиц на несколько нм.

Третья стратегия оптимизации заключается в нанесении SiO_2 -оболочки на полученные наночастицы $Y_2O_3:Eu^{3+}$. Нанесение SiO_2 -оболочки толщиной 1.5 нм не только позволило достичь квантового выхода 68%, но и улучшило термическую стабильность полученных нанопорошков. Так, отжиг при 700 °С в течение 4 ч. практически не привел к укрупнению частиц, а также предотвратил нежелательные фазовые превращения при более высоких температурах отжига.

Стоит отметить, что полученные значения квантового выхода ФЛ являются рекордными для оксидных люминофоров подобного размера и по своим значениям приближаются к одним из самых высокоэффективных люминофоров микронного размера. В докладе подробно будут рассмотрены механизмы влияния предложенных способов оптимизации на эффективность люминесценции $Y_2O_3:Eu^{3+}$, а также их преимущества и недостатки по отношению друг к другу.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 22-73-00106.

УПРАВЛЕНИЕ МИКРОМАГНИТНОЙ СТРУКТУРОЙ МНОГОСЛОЙНЫХ ТОНКИХ ПЛЁНОК Co/Pt ПУТЁМ МОДУЛЯЦИИ СОСТАВА

Дорохин М.В.¹, Дёмина П.Б.¹, Здоровейщев А.В.¹, Здоровейщев Д.А.¹, Темирязов А.Г.², Темиряева М.П.², Калентьева И.Л.¹, Трушин В.Н.¹

¹ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия, dorokhin@nifti.unn.ru

²Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Фрязино, Россия

Работа посвящена исследованию микромагнитной структуры в многослойных плёнках Co/Pt с отсутствием четких границ между слоями. Предыдущие исследования показали возможность формирования в таких структурах наноразмерных магнитных доменов (скирмионов).

Многослойные плёнки [Co/Pt]₁₀ формировались путём поочерёдного напыления слоёв ферромагнетик/тяжёлый металл на подложку GaAs методом электронно-лучевого испарения. Варьирование фазового состава в работе осуществлялось путём независимого изменения относительных толщины слоёв Co и Pt.

Исследования микромагнитной структуры осуществлялись на микроскопе Solver P7LS (NT-MDT) в двухпроходном режиме. Измерения аномального эффекта Холла выступали в качестве оценки намагниченности плёнок (M), так как сопротивление Холла $R_H(H)$ пропорционально $M(H)$ [1]. Исследования фазового состава и кристаллической структуры плёнок выполнены методом рентгеновской дифракции (РД) на дифрактометре Shimadzu 7000.

Плёнки представляют собой разупорядоченную поликристаллическую систему с размерами кристаллитов менее 10 нм. На спектрах РД положение основного максимума для большинства образцов не соответствует ни линиям для Co и Pt, ни соединениям Co-Pt. Аналитическая программа интерпретирует указанные пики как твёрдый раствор $CoPt(x)$ с составом, зависящим от соотношения толщин. Исследования эффекта Холла показали, что для структур с малым содержанием Co характерна ярко выраженная перпендикулярная магнитная анизотропия с осью лёгкого намагничивания, лежащей в направлении роста. По мере увеличения толщины Co или снижения толщины Pt, уменьшается остаточная намагниченность и возрастает магнитное поле насыщения. На подмагниченном поле магнитного зонда МСМ-изображениях плёнок [Co/Pt]₁₀ наблюдались особенности в виде тёмных контрастных пятен, которые интерпретируются как скирмионы. Размер и концентрация скирмионов зависят от толщины слоёв Co и Pt. В структуре с наименьшей толщиной регистрируется однородный магнитный контраст без особенностей. При увеличении толщины варьированного слоя регистрируются скирмионы, концентрация которых растёт с ростом толщин Co(Pt) до значения 4 Å.

Проведенный анализ позволяет предположить, что существенную роль в многослойных магнитных плёнках [Co/Pt]₁₀ играет диффузия атомов Co и Pt. Наличие растворённых и нерастворённых слоёв Pt и их толщина определяют характер магнитных взаимодействия в плёнках и формирующуюся микромагнитную структуру.

Работа была выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ №21-79-20186.

Литература

1. Woolley J.C., Phillips J.H., Clark J.A. // J. of Less-Com. Metals. – 1964. – № 6. С. – 461-465.

МОДИФИКАЦИЯ СТРУКТУРНЫХ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СУЛЬФИДА МЫШЬЯКА ПЕРЕХОДНЫМИ МЕТАЛЛАМИ

Провоторов П. С.¹, Крбал М.², Колобов А. В.¹

¹*РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия, p.provotorov95@yandex.ru*

²*University of Pardubice, Pardubice, Czech Republic.*

После открытия Коломийцем Б.Т. и Горюновой Н.А. в Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе в середине 50-х годов прошлого века полупроводниковых свойств у халькогенидных стеклообразных полупроводников началось активное исследование стекол, содержащих в своем составе серу, селен или теллур. Характерной чертой полупроводниковых свойств в халькогенидных стеклах является наличие неподеленных пар электронов в валентной зоне, не участвующих в образовании связей, но чувствительных к воздействиям температуры [1], фотонов [2] и т.д. За счет изменения концентрации неподеленных пар электронов возможно варьировать свойства халькогенидов в относительно широком диапазоне. Одним из методов управления характеристик халькогенидных материалов является модификация переходными металлами [3]. В настоящей работе представлено исследование сульфида мышьяка, модифицированного молибденом и вольфрамом.

Экспериментально были получены данные об оптических и структурных свойствах тонких пленок As_2S_3 мышьяка, легированных W и Mo, полученных на стеклянной подложке методом спин-коатинга. Полученные образцы отжигались в диапазоне температур от 70 до 200 °С. Оптические свойства измерялись методом спектрофотометрии в диапазоне длин волн от 200 до 1600 нм. Структурные свойства изучались методом комбинационного рассеяния света и методом нарушенного полного внутреннего отражения.

Показано что модификация переходными металлами сульфида мышьяка приводит к существенному изменению свойств стекла, в частности к повышению термической стабильности стекол, уменьшению ширины запрещенной зоны [4], а также уменьшению фотоотклика (фотоструктурные превращения), что связано с уменьшением концентрации неподеленных пар при легировании переходными металлами [5].

Работа выполнена в рамках совместного международного проекта, поддержанного РФФИ и Чешским научным фондом (грант РФФИ - 19-53-26017, грант ЧНФ - 20-23392J).

Литература

1. Nemanich R.J., Connell G. A.N., Hayes T.M., Street R.A. // *Phys. Rev.* – 1978 – V. 18. – №12. – С. 6900.
2. Tanaka K. // *Semiconductors.* – 1998 – V. 32(8). – С. 861–866.
3. Kolobov A.V., Tominaga J. // *Springer.* – 2016.
4. Provotorov, P.S., Avanesyan, V.T., Krbal, M., Kolobov, A.V. // *Phys. Comp. Syst.* – 2021 – V. 2. – С. 115–121.
5. Krbal, M., Prokop, V., Cervinka, V., Slang, S., Frumarova, B., Mistrík, J., Provotorov, P., Vlcek, M., Kolobov, A.V., 2022. // *Mater. Res. Bul.* – V. 153 – С. 111871.

ПОЛУЧЕНИЕ АЛЮМИНИЕВОГО КОМПОЗИТА, АРМИРОВАННОГО УГЛЕРОДНЫМ ВОЛОКНОМ МЕТОДОМ КОМПАКТИРОВАНИЯ

Атанов Б.И.¹

¹ *Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН, г. Черноголовка, Россия, but305@mail.ru*

Ключевые слова: ММК; углеродное волокно/алюминиевая матрица; композит; углеалюминиевая проволока

Одной из важных проблем современного материаловедения является получение более лёгких и прочных материалов. Традиционные металлические материалы уже подошли к пределу своей применимости, поэтому роль новых материалов на себя приняли композиты [1]. К ним относятся и композиты с металлической матрицей, армированные углеродными волокнами [2]. Алюминий является одним из наиболее актуальных в качестве матрицы в виду его низкой плотности и технологичности [3].

Получение композита происходило в 2 этапа. На первом этапе была получена проволока протяжкой углеродного волокна через расплав алюминия (рис. 1а). Пропитка достигалась посредством обработки расплава алюминия ультразвуком [4]. На втором этапе полученные проволоки закладывались в оснастку и компактировались в вакуумной печи при разных режимах (рис. 1б).

Было исследовано влияние режимов компактирования на его микроструктуру, свойства и характер разрушения. Показано, что с увеличением температуры, нагрузки и времени выдержки происходит уменьшение пор между проволоками и увеличение объёмной доли волокна. Во всех случаях форма поверхности разрушения свидетельствует о том, что разрушение композита носит хрупкий характер.

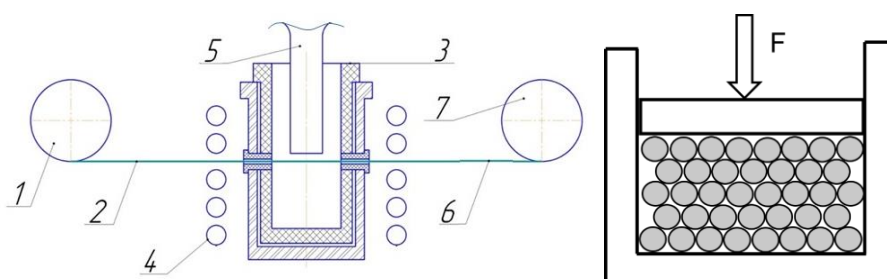


Рис. 1. Схемы протяжки (а) и компактирования (б) CF/Al – композита [1].

Литература

1. Астанин В.В. Микроструктурный дизайн перспективных материалов и композитов на их основе: Учебное пособие. Издание второе, исправленное и дополненное/– Уфа: УГАТУ, 2008. –80с.
2. S.T. Mileiko, Metal and Ceramic Based Composite, Elsevier, Amsterdam, 1997, p. 690
3. С. Т. Милейко. Антони Келли и Композиты сегодня. Часть 2: Композиты с металлической матрицей. Композиты и наноструктуры. 13. 51–52 (2021)].
4. Galyshev S. On the Strength of the CF/Al-Wire Depending on the Fabrication Process Parameters: Melt Temperature, Time, Ultrasonic Power, and Thickness of Carbon Fiber Coating. Metals. 2021; 11(7):1006.

Финансирование: Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-79-10064

**PROBLEMS AND PROSPECTS OF ULTRAPURIFICATION OF
RARE EARTH METALS.**

A.M.Ionov, and V.T.Volkov*,

*Institute of Solid State Physics
Institute of Microelectronics and High Purity Materials*
Russian Academy of Sciences, Chernogolovka 142432, Moscow region, Russia*

Most physical properties of metals and especially of rare-earth metals are very sensitive to content of impurities and new results in this field of solid state physics (see [1]) clearly demonstrate the importance of experiments on high purity samples. However, it is well known that ultrapurification of rare earth metals and single crystal growth [2,3] are difficult and complex problems. Technological problems arise because of high chemical reactivity of RE and it is now obvious that only multi-stage technique starting from high purity precursors can achieve ultra high purity of rare earth metals. At present the purest samples of rare-earth (RE) metals are obtained using ultra-high vacuum technologies. Analysis of experimental results shows that major limiting impurities are oxygen and carbon, and further increase of efficiency of purification is closely associated with phenomena occurring on the metal surface: adsorption, desorption, and diffusion of impurities, as well as chemical reactions taking place on the surface. Taking into account the importance of processes occurring on a surface of metals for purification, the investigations of phenomena taking place on the surfaces of RE metals are very interesting. Aspects of experimental setups and conditions and its influence on behavior and redistribution of impurities are analyzed and future perspective of methods are discussed. Some novel UHV approaches and experimental improvements made for increasing the purification effectiveness are presented and discussed.

Literature

1. K.A.Gschneidner Jr., V.K.Pecharsky, D.Fort, Phys. Rev. Letters, 78, (1997) 4281.
2. D.Fort, B.J.Beaudry and K.A.Gschneidner Jr., J. of Less-Common Metals, 134 (1987) p27.
3. D.Fort, J. of Less-Common Metals, 134 (1987) p45.

НАНОАЛМАЗНЫЕ ИОННО-ПЛАЗМЕННЫЕ ЗАЩИТНЫЕ ПОКРЫТИЯ**Сигалаев С.К.¹, Шевченко Н.В.², Ризаханов Р.Н.¹, Высотина Е.А.¹**¹*АО Центр Келдыша, Москва, Россия, nanocentre@kerc.msk.ru*²*АО «Петровский научный центр «Фугас», Москва, Россия, ssk0659@mail.ru*

Интенсивное развитие физики плазмы, вакуумной и лазерной техники расширило возможности модифицирования материалов с заданными трибологическими и физико-механическими свойствами, используемыми в качестве защитных покрытий. Одной из таких возможностей является магнетронное ионно-плазменное получение наноструктурных покрытий физическим осаждением частиц из газовой фазы PVD (Physical Vapor Deposition). Функциональная эффективность ионно-плазменных покрытий может быть существенно повышена модификацией материала покрытия наноуглеродными добавками, в качестве которых могут служить детонационные наноалмазы (ДНА) [1,2].

Целью настоящей работы являлось получение хром-наноалмазных покрытий методом ионно-плазменного магнетронного напыления, изучение их структуры и функциональных свойств. В ходе работы с ДНА была проведена оценка сохранения наночастиц при их плазменном переносе, а также их влияние на характеристики модифицированных покрытий. Свойства, наноструктура и фазовый состав покрытий были исследованы методами просвечивающей электронной микроскопии, комбинационного рассеяния света, рентгеновской дифракции и ряда других [3].

Полученные результаты о составе и физико-химических свойствах ионно-плазменных покрытий показали, что перенос кластеров ДНА в их состав происходит без существенных их изменений, что обеспечивает значительное повышение структурно-механических характеристик покрытий. При этом происходит сохранение sp^3 углеродной фазы в покрытии, что, по-видимому, сопровождается образованием сетки четырехвалентных связей углерода. Применение ДНА позволяет наносить более тонкие защитные покрытия с большими значениями микротвёрдости. Кроме того, модифицированные ДНА ионно-плазменные покрытия обладают значительно более низкой шероховатостью и большей износоустойчивостью по сравнению с другими типами использованных для сравнения покрытий. При этом было показано, что проявление свойств ДНА в ионно-плазменных покрытиях более чем в полтора раза превышает аналогичное проявление наноалмазов в покрытиях, полученных электро-гальваническим способом.

Ионно-плазменная технология реализует кластерный перенос наночастиц ДНА в состав покрытия и, одновременно, его структурную модификацию, что способствует формированию в нём композита из ДНА в составе кристаллической структуры хрома [4], увеличивая микротвёрдость покрытия. Указанные преимущества магнетронного метода напыления цельных наноструктурных компонентов, обеспечивает покрытия поверхности деталей, обладающих более высоким их качеством по сравнению с другими способами, а также увеличение сроков эксплуатации изделий и повышение их надежности.

Литература

1. Андреев М.А., Кузнецова Г.А., Маркова Л.В., Чекан В.А. Износостойкость композиционных хромовых покрытий с добавками ультрадисперсных алмазов. // Трение и износ. - 2001.- Т.22, - № 4. – С. 423-427.
2. Горбачев В.А., Хрущев А.А., Шевченко Н.В., Сигалаев С.К., Ефремов В.П. Модификация наноалмазами ионно-плазменных защитных покрытий. // XVI Научная конференция РАРАН. -М. -2022.- С.157-170.
3. Шевченко Н.В., Горбачев В.А., Чобанян В.А., Сигалаев С.К., Ризаханов Р.Н., Голубев А.А., Кириченко А.Н., Ефремов В.П. Свойства и фазовый состав поверхности детонационных наноалмазов. // Изв. вузов. Химия и хим. технология. -2016. –Т. 59. – Вып. 8.-С. 440-445.
4. Andreyev V. A., Markova L.V., Kuznetsova T.A., Anishchik V.A. Ionbeam coating based on Ni and Cr with ultradispersed-diamond structure and properties. // Vacuum. - 2005. –V.78. – P. 451-454.

ЭФФЕКТЫ ПЛАСТИФИКАЦИИ В УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОМ НИЗКОЛЕГИРОВАННОМ Al-Mg-Zr СПЛАВЕ

Орлова Т.С.¹, Мавлютов А.М.¹, Садыков Д.И.^{1,2}, Мурашкин М.Ю.¹

¹Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия, orlova.t@mail.ioffe.ru

²Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия

Два новых явления - упрочнение в результате кратковременного низкотемпературного отжига (УО) и увеличение пластичности после последующей дополнительной деформации (УПД) – были продемонстрированы для ультрамелкозернистых (УМЗ) Al [1] и сплава Al-0.4Zr [2], структурированных методами интенсивной пластической деформации кручением (ИПДК). Такое поведение не типично для крупнозернистых состояний. Для объяснения этих эффектов в УМЗ Al были предложены теоретические модели, основанные на изменении дислокационной структуры (равновесное – неравновесное состояние) границ зерен (ГЗ) [1]. Предложенная деформационно-термическая обработка (ДТО) ‘отжиг + дополнительная деформация’ открывает перспективы значительного повышения пластичности различных УМЗ материалов при сохранении их высокой прочности. Известно, что в ряде сплавов при структурировании методами ИПД, а также при отжиге примесные элементы могут сегрегировать и/или формировать нанопреципитаты на ГЗ, что может повлиять на реализацию эффектов УО и УПД. Например, в процессе ИПДК Mg сегрегирует в ГЗ в Al-Mg сплавах [3].

В настоящей работе исследовалось влияние дополнительной ДТО двух видов: 1) отжиг и небольшая дополнительная ИПДК деформация (0.25-0.75 оборотов) при КТ, 2) ИПДК при повышенной температуре на 10 оборотов и небольшая дополнительная ИПДК деформация при КТ, на микроструктуру, механические свойства и электропроводность низколегированного сплава Al-0.53Mg-0.27Zr (вес.%) в УМЗ-состоянии, сформированном предварительной ИПДК на 10 оборотов при КТ (состояние НРТ).

Показано, что оба типа ДТО приводят к значительному эффекту УПД при сохранении прочности на уровне ≤ 80 % от прочности в состоянии НРТ. Наилучшее сочетание высоких значений прочности ($\sigma_{UTS} \approx 370$ МПа), пластичности ($\delta \approx 15\%$) и электропроводности ($\sim 53\%$ IACS) достигнуто после ДТО второго типа. Полученная комбинация свойств превышает подобные характеристики, достигнутые у разрабатываемых УМЗ сплавов систем Al-Cu-Zr и Al-Fe, а также у ряда коммерческих сплавов на основе Al-Zr системы. Эффект УО не наблюдается в УМЗ сплаве Al-0.53Mg-0.27Zr, что, наиболее вероятно, связано с закреплением зернограницных дислокаций (ЗГД) примесными сегрегациями.

Анализ соотношения микроструктура – свойства показал, что основным микроструктурным фактором, обеспечивающим колоссальный прирост пластичности при ДТО обоих типов, является увеличение плотности внесенных подвижных ЗГД.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №22-19-00292).

1. T.S. Orlova et al. Rev. Adv. Mater. Sci. 57 (2) (2018) 224-240.
2. T.A. Latynina et al. Phil. Mag. 99 (2019) 2424-2443.
3. X. Sauvage et al. Acta Mater. 72 (2014) 125-136.

ВЛИЯНИЕ ПОСЛЕРОСТОВЫХ ИЗОТЕРМИЧЕСКИХ ОТЖИГОВ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ $\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$

Деев Г.Ю.¹, Козлова Н.С.¹, Забелина Е.В.¹,
Касимова В.М.¹, Бузанов О.А.², Пилюшко С.М.¹

¹Испытательная лаборатория «ИЛМЗ» НИТУ МИСИС, Москва, Россия,

deew.german@ya.ru, ilmz@misis.ru

²АО «Фомос-Материалы», Москва, Россия, buzanov@newpiezo.ru

Кристалл катангасита $\text{Ca}_3\text{TaGa}_3\text{Si}_2\text{O}_{14}$ относится к семейству лангаситов $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ и имеет структурный тип кальций-галлогерманата $\text{Ca}_3\text{Ga}_2\text{Ge}_4\text{O}_{14}$, точечная группа симметрии 32. Катангасит обладает уникальными свойствами, позволяющими использовать его в пьезоэлектронике, акустоэлектронике и нелинейной оптике. Высокая температурная стабильность свойств расширяет его диапазон применения по сравнению с изоморфами. Применение кристаллов в качестве рабочих элементов современных высокоточных устройств, особенно при высоких температурах, а также при перепадах температур, устанавливает жесткие требования к качеству самих кристаллов. Дефекты оказывают существенное влияние на характеристики кристаллов, поэтому изучение их дефектной структуры играет важную роль в повышении качества продукции. Кристаллы катангасита являются наименее исследованными из кристаллов семейства лангасита. Установлено [1], что атмосфера, в которой выращиваются кристаллы катангасита, оказывает существенное влияние на их окраску, наличие и интенсивность полос поглощения на спектральных зависимостях пропускания. Природа этих полос поглощения окончательно не установлена. Показано [2], что в еще одном кристалле семейства лангаситов, лангатате $\text{La}_3\text{Ta}_{0,5}\text{Ga}_{5,5}\text{O}_{14}$, наличие F-центров приводит к появлению на спектральных зависимостях пропускания полосы поглощения при $\lambda \sim (480-490)$ нм. Особенностью кристаллов семейств лангасита является наличие дихроизма, которое необходимо учитывать при интерпретации экспериментальных результатов. Целью данной работы было исследование влияния послеростовых изотермических отжигов в вакууме и на воздухе на оптические свойства кристаллов катангасита.

Кристаллы катангасита были выращены в компании АО «Фомос-Материалы». Образцы были исследованы в исходном состоянии, а также после отжигов в вакууме при температуре 1000°C и на воздухе при температурах 800°C и 1200°C. Показано, что в исходном состоянии на спектральных зависимостях катангасита в УФ и видимом диапазонах длин волн наблюдается 4 полосы поглощения на 290, 360, 460 и 605 нм. Наиболее ярко дихроизм проявляется на полосе поглощения 460 нм. Установлено влияние послеростовых изотермических отжигов на спектральные зависимости пропускания кристаллов катангасита.

Исследования проводились при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ВУЗам FSME-2023-0003.

Литература

1. N.S. Kozlova, A.P. Kozlova, D.A. Spassky, E.V. Zabelina IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – IOP Publishing, 2017. – Т. 169. – №. 1. – С. 012018.
2. N. Kozlova, O. Buzanov, E. Zabelina, A. Kozlova, M. Voronova, K. Shcherbachev, E. Skryleva // Optical Materials. – 2019. – Vol. 91. – p. 482-487

ВНУТРИЗОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ КВАНТОВЫМИ НАНОСТРУКТУРАМИ

Б.Г.Ибрагимов,

Министерства науки и образования Институт физики,

AZ 1143, г. Баку, пр. Г.Джавида, 131

behbud.ibrahimov.93@mail.ru

В настоящее время значительный интерес проявляется к системам, в которых движение электрона ограничено в одном или двух направлениях. Наиболее интересная ситуация имеет место, когда конфайнмент порядка длины волны де Бройля для электронов. В квантовой проволоке, когда ее ширина становится много меньше длины свободного пробега, движение электронов становится квази одномерным. Существуют квази одномерные структуры, в которых движение носители квантуется в поперечных направлениях. Для носителей, ограниченных в квантовых ямах, поглощение света свободными носителями практически важно для определения оптического поглощения. Поглощение света свободными носителями является существенным непрямым внутризонным явлением перехода. Оно учитывает поглощение электромагнитного излучения с частотой, меньшей частоты, при которой возникают внутризонные переходы и требуется посредничество фононов и несовершенств для сохранения общего импульса. Поглощение света свободными носителями, таким образом, позволяет определять возможные механизмы рассеяния, действующих в системе .

Поглощение света свободными носителями теоретически изучалось в квази одномерных структурах только (как нам известно) для случая, когда носители рассеиваются на акустических [1], акустических и оптических фононах [2], шероховатости границы [3] и сплавном беспорядке [4]. Однако, рассеивание дислокациями края является важным механизмом рассеяния в квантовых ямах системах.

Целью этой работы является теоретическое изучение влияния дислокаций края на поглощение свободных носителей квантовых проволок во внешнем продольном магнитном поле.

В работе развита теория магнитопоглощения свободных носителей вызванное рассеянием дислокациями края в одномерном электронном газе. В предположении, что поле излучения поляризовано вдоль квантовой проволоки и рассматривая рассеяние дислокациями края в рамках теории Бонч-Бруевича и Когана, получены выражения для коэффициента поглощения свободных носителей.

Литература

- [1] Kubakaddi S.S., Mulimani B.G. // J. Phys. C: Solid State Phys. -1985, -18, -С.6647.
- [2] Adamska H., Spector N. // J. Appl. Phys. -1986, -59, -С 619.
- [3] Ibragimov G.B. // Phys.: Condens. Matter 15 -2003, -С.1427 – 1435.
- [4] Ibragimov G.B. // J. Phys.: Condens. Matter 14, -2002, -С.8145 – 8152.

ОСОБЕННОСТИ МАГНИТНЫХ ТЕКСТУР В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЁНКАХ Co/Pt

Д.А. Татарский^{1,2*}, Н.С. Гусев^{1,2}, О.Л. Ермолаева¹,
А.Н. Орлова¹, В.Л. Миронов¹, С.А. Гусев¹

¹Институт физики микроструктур РАН, ул. Академическая, д. 7,
Нижний Новгород, 603087.

²Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
пр. Гагарина, 23, Нижний Новгород, 603950.

*tatarsky@ipmras.ru

Приводятся результаты систематических экспериментальных исследований магнитного состояния и кристаллической структуры многослойных пленок на основе пары ферромагнетик/тяжёлый металл (Co/Pt). Показано, что с ростом числа периодов Co/Pt в пленках наблюдается увеличение средних размеров кристаллических зерен, что приводит к увеличению дисперсии перпендикулярной анизотропии и, как следствие, к уменьшению размеров магнитных доменов и полей перемагничивания.

Тонкопленочные структуры Co/Pt изготавливались методом магнетронного напыления в атмосфере аргона при комнатной температуре. Выращивание многослойных структур производилось путем последовательного распыления мишеней Co, Pt и Ta. На подложки с буферными слоями осаждались многослойные структуры $[\text{Co}(0.5 \text{ nm})/\text{Pt}(1.0 \text{ nm})] \times N$, где N число периодов в структуре. Для исследований была изготовлена серия образцов с количеством периодов $N = 2-18$. Контроль магнитных свойств пленок осуществлялся методами оптической магнитометрии при помощи измерения магнитооптического эффекта Керра (МОКЕ) в полярной геометрии на длине волны 632 нм (стенд разработан в ИФМ РАН). Доменная структура намагниченности исследовалась с помощью магнитно-силового микроскопа «Solver Pro» (NT-MDT Spectrum Instruments, Зеленоград). Структурные и лоренцевские исследования плёнок проводились на просвечивающем электронном микроскопе «LIBRA 200 MC» (Carl Zeiss, Jena), адаптированном для работы в режиме лоренцевой микроскопии.

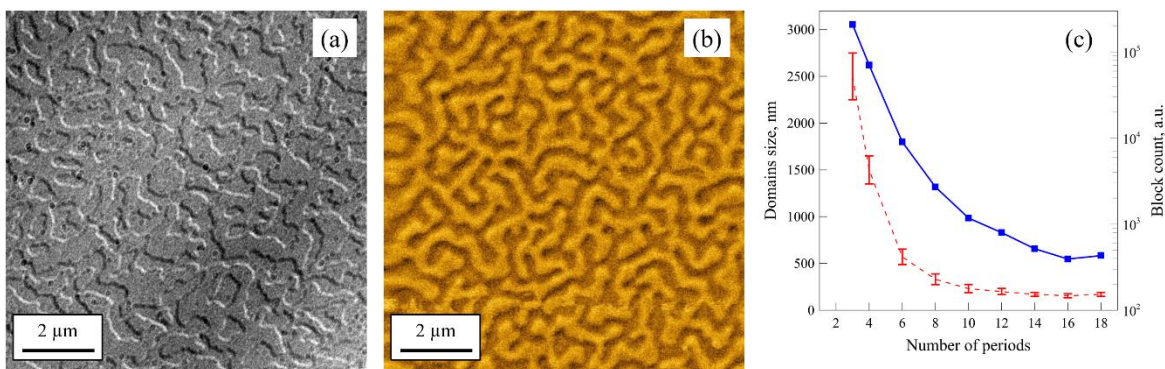


Рис. 1. френелевский (a) и магнитно-силовой (b) контрасты на микрофотографии размагниченной плёнки Co/Pt

Сопоставление размеров доменов (Рис. 1a,b) и размеров кристаллитов в зависимости от количества периодов даёт очень сильную зависимость количества кристаллитов в одном домене (). Также френелевский контраст (Рис. 1a) позволяет утверждать, что сами доменные стенки имеют неелевский тип.

Работа поддержана грантом РФФ №21-72-10176. В работе использовано оборудование ЦКП «Физика и технология микро- и наноструктур» (ИФМ РАН).

ПОВЕРХНОСТЬ С КОБАЛЬТОВЫМИ НАНОПРОВОЛОКАМИ В КАЧЕСТВЕ КАТАЛИЗАТОРА ГИДРИРОВАНИЯ ЭТИЛЕНА

Панов Д.В.^{1,3}, Бычков В.Ю.², Тюлений Ю.П.², Михайловская А.Г.^{1,3}, Загорский Д.Л.¹, Муслимов А.Э.¹

¹ФНИЦ «Кристаллография и Фотоника» РАН, Москва, Россия

²ФГБУН ФИЦ Химической физики РАН, Москва, Россия

³МИЭМ НИУ ВШЭ, Москва, Россия

В настоящей работе была изучена каталитическая активность массива кобальтовых нанопроволок (НП) в реакции гидрирования этилена. Известно, что структурирование поверхности – например, создание на ней массива нанопроволок – позволяет в десятки раз увеличить её площадь. Последнее в ряде случаев даёт возможность усилить каталитический эффект и успешно использовать дешёвые материалы с относительно низкой каталитической способностью. Так, ранее в [1] был показан эффект использования медных НП в реакции окисления окиси углерода.

В работе с использованием полимерных трековых мембран (производства ОИЯИ, г. Дубна) в качестве темплатов методом матричного синтеза были получены образцы с массивами кобальтовых НП различного диаметра (30 нм, 65 нм, 100 нм и 200 нм) и различной длины (2,4,6 и 8 мкм). Каталитическая активность оценивали путём измерения концентрации этилена в газовой смеси после проведения реакции. В реактор загружали образцы с массивом кобальтовых НП (размером 15×5 мм) и образец с кобальтом на плоской поверхности. Образцы ступенчато нагревали в интервале температур 100 - 350 °С. Наибольший выход был получен для образцов с диаметром 100 нм (Рис.1а).

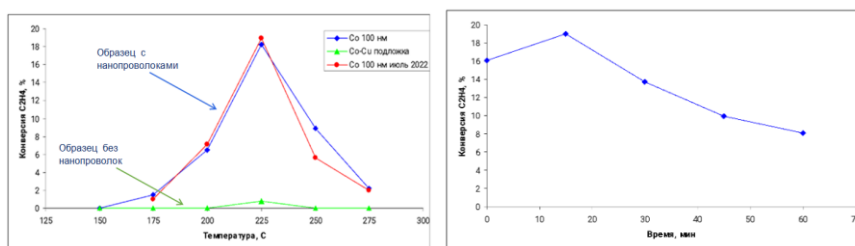


Рис. 1. а-Каталитическая активность НП из кобальта (внизу-данные для плоской поверхности); б- Зависимость каталитической активности от времени при температуре 225°С

Данные Рис.1а позволяют сделать вывод о том, что применение образца с массивом НП даёт заметно более высокую конверсию по сравнению с плоской поверхностью. Максимальное усиление конверсии (до 20%) наблюдается при сравнительно низких температурах - 225 °С. Важнейшим параметром образцов является их стабильность. На Рис.1б приведена зависимость конверсии от времени проведения процесса. Видно, что величина конверсии уменьшается, однако изменения эти невелики. Согласно РЭМ исследованию массивов НП до и после реакции значимых изменений НП не происходит. В тоже время, элементный анализ показал образование некоторого количества углерода на поверхности НП.

Показано, что массив из кобальтовых НП обладает каталитической активностью в реакции гидрирования этилена. Наибольшая конверсия в 20% наблюдается в НП с диаметром 100 нм при температуре 225 °С. Благодаря низкому температурному режиму реакции использование кобальтовых НП особенно привлекательно.

Благодарности. Работа проведена по Госзаданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника»

[1] Д.В.Панов и др. Поверхность.. 2021, №12, с.1-8.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОБЛУЧЕНИЯ НИЗКОЭНЕРГЕТИЧНЫМ ПУЧКОМ НА СВОЙСТВА СВЕЖЕВВЕДЕННЫХ ДИСЛОКАЦИЙ В GaN

Вергелес П.С.¹, Якимов Е.Б.^{1,2}, Кулачиков Ю.О.^{1,2}

¹ *Институт проблем технологий микроэлектроники РАН,
г. Черноголовка, Россия, vergelesp@gmail.com*

² *Национальный университет науки и технологий МИСиС, г. Москва, Россия*

Широкозонные полупроводниковые материалы такие, как SiC или GaN и твердые растворы на его основе, широко используются для производства мощных оптоэлектронных приборов. Однако свойства протяженных дефектов в этих материалах, например, дислокаций, которые могут влиять на рабочие характеристики прибора, остаются все еще до конца не выясненными. В этой работе представлены результаты исследования влияния облучения низкоэнергетичным электронным пучком на свойства дислокаций в GaN. Исследования проводились на свежевведенных дислокациях при деформации исследуемого образца.

В проведенных исследованиях в основном использовался кристалл HVPE n-GaN толщиной 450 мкм, однако некоторые измерения проводились и на других кристаллах GaN, выращенных как методом HVPE, так и MOCVD. Деформации проводились при помощи индентора типа Виккерса при комнатной температуре. При этом делались как царапины, так и отдельные уколы. Исследования методом КЛ и облучение низкоэнергетичным электронным пучком осуществлялись в сканирующем электронном микроскопе JSM-6490 (Jeol) с системой MonoCL-3 в диапазоне температур от температуры жидкого азота до комнатной. Энергия электронного пучка, как во время облучения, так и при получении изображения была равна 10 кэВ, так как при такой энергии достигалось наилучшее разрешение.

Известно, что дислокации в GaN могут вводиться при пластической деформации при комнатной температуре и при этом появляется новая линия свечения с энергией фотона около 3.1 эВ. В литературе эту полосу чаще всего связывают с излучением полных или расщепленных винтовых дислокаций. Однако, наши исследования показывают, что данная линия излучения, скорее всего, связана с комплексами точечных дефектов, генерируемых скользящей дислокацией.

В предыдущих исследованиях из зависимостей размера дислокационной розетки от температуры при индентировании при разных температурах, нами была оценена энергия активации скольжения дислокаций в GaN, которая оказалась меньше 1 эВ. В рамках этой работы мы изучили влияние облучения низкоэнергетичным электронным пучком на свежевведенные дислокации при температуре жидкого азота. Эти исследования показали, что даже при таких низких температурах дислокации подвержены эффекту рекомбинационно-ускоренному скольжению (эффект recombination-enhanced dislocation glide – REDG), что подтверждает, что энергия активации скольжения дислокаций в GaN существенно меньше 1 эВ.

СВЕРХНИЗКИЕ ЗНАЧЕНИЯ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ ДЛЯ МИГРАЦИИ ПЕРЕГИБОВ ВДОЛЬ ЧАСТИЧНОЙ ДИСЛОКАЦИИ В 4Н-SiC**Якимов Е.Е., Якимов Е.Б.***ИПТМ РАН, г. Черноголовка, e-mail: yakimov@iptm.ru*

Хорошо известно, что дефекты упаковки в 4Н-SiC могут генерироваться и расширяться в процессе работы силовых приборов, что приводит к деградации их свойств. Поскольку расширение дефектов упаковки контролируется скольжением частичных дислокаций, исследования подвижности частичных дислокаций при инжекции неравновесных носителей заряда представляют как научный, так и практический интерес. В настоящей работе дефекты упаковки вводились в 4Н-SiC с концентрацией доноров $5 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ при облучении электронным пучком в РЭМ JSM 6490 в интервале температур 80 – 300 К. Исследования дефектов упаковки и их расширения в процессе облучения проводились методом катодоллюминесценции в том же микроскопе с использованием системы MonoCL3. Для зарождения дефектов упаковки на поверхность, наклоненную на 4° по отношению к базисной плоскости, при комнатной температуре наносились отпечатки алмазного индентора. Влияние электронного пучка на подвижность частичных дислокаций, приводящих к расширению дефектов упаковки, исследовалось в двух режимах: при облучении в точке и при сканировании с разными скоростями и разным числом линий сканирования, что позволило варьировать длительность облучения дислокации и промежутки времени между последовательными облучениями.

Общепринято, что дислокации в ковалентных кристаллах движутся путем зарождения и расширения двойных перегибов, а при облучении электронным пучком энергия, освобождающаяся в результате рекомбинации неравновесных носителей заряда, стимулирует преодоление барьеров для их зарождения и/или миграции (рекомбинационно-ускоренное скольжение дислокаций (REDG)). Разделить вклады зарождения перегибов и из миграции в подвижность дислокаций достаточно сложно и это удалось сделать только для нескольких материалов. Оказалось, что в 4Н-SiC при REDG такой простой метод, как точечное облучение, позволяет провести такое разделение. Обнаружено, что, если пучок локально облучает дислокацию, то она движется как прямая линия, даже на расстояниях порядка 100 мкм от места облучения. Обнаружено также, что при сканировании изображение дислокации зависит от промежутка времени между последовательными линиями сканирования, т.е. дислокация может двигаться и во время этого промежутка. Следует отметить, что, описанное движение дислокаций при облучении электронным пучком наблюдается и при 80 К. Полученные результаты могут быть объяснены в предположении, что электронный пучок стимулирует только зарождение двойных перегибов, а их расширение происходит с очень низкой энергией активации и не требует возбуждения электронным пучком. Поскольку аналогичные результаты наблюдаются во всем диапазоне температур от 80 до 300 К, эту энергию можно оценить в несколько мэВ. Более того, оценка скорости двойных перегибов показывает, что при азотной температуре она всего в 2-3 раза меньше, чем при комнатной. Следует также отметить, что проведенные ранее теоретические исследования показали, что некоторые конфигурации перегибов, действительно позволяют им двигаться с низкой энергией активации, хотя и в несколько раз большей, чем значения, полученные в настоящей работе.

НЕРАВНОВЕСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ПЛАНАРНЫХ МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ ДЖОЗЕФСОНОВСКИХ SNS СТРУКТУРАХ С НИОБИЕМ

Голикова Т. Е.¹, Лакунов И. С.¹, Егоров С.В.¹, Батов И.Е.¹, Рязанов В.В.¹

¹*ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия, golt2@list.ru*

²*Организация, город, страна, E-mail*

Экспериментально исследованы неравновесные явления в планарных джозефсоновских SNS наноструктурах с Nb в качестве сверхпроводника (S). В качестве нормального металла (N) использовались Cu и Al (выше температуры сверхпроводящего перехода). Исследуемые структуры были изготовлены методом электронной литографии на двойном резисте и последующего теневого напыления в виде планарных джозефсоновских SNS-мостиков с несколькими нормальными электродами, присоединенными к противоположным S-берегам SNS контакта, расположенными на различных расстояниях от слабой связи. Были проведены измерения при низких температурах с инъекцией неравновесных квазичастиц с помощью локальной и нелокальной схем по аналогии с [1,2]. Впервые экспериментально определена длина зарядового разбаланса λ_Q^* в ниобии при температурах существенно ниже температуры сверхпроводящего перехода.

Также подробно исследована резистивная аномалия в виде пика сопротивления на переходе в сверхпроводящее состояние SNS контакта Nb-Al-Nb (где Al использовался в качестве нормального металла). Были проведены исследования этой особенности в зависимости от транспортных токов в SNS контакт, магнитного поля и тока инъекции квазичастиц из нормального электрода. Значение сопротивления в максимуме вблизи температуры сверхпроводящего перехода превышает сопротивление всей структуры в нормальном состоянии и связано с явлением зарядового разбаланса, проявляющемся на характерной длине λ_Q^* [3].

Литература

1. Т. Е. Golikova, M. J. Wolf, D. Beckmann et al. //Phys. Rev. B -2014.-89.-104507.
2. К. Yu. Arutyunov, S. A. Chernyaev, T. I. Karaba-sov et al. // J. Phys.: Condens. Matter -2018.-30.-343001
3. К. Ohnishi, T. Kimura and Y. Otani // J Supercond Nov Magn -2011.-24.-303306.

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ПРОВОДИМОСТЬ СИН СТРУКТУР.

Тарасов М.А.¹, Эдельман В.С.²¹ИРЭ РАН, Москва, РФ, tarasov@hitech.cplire.ru²ИФП РАН, Москва, РФ, vsedelman@yandex.ru

Измерены ВАХ тонкослойных структур алюминий — окись алюминия медь (СИН) в полях до 28мТл при температуре порядка 0.1К. В отсутствие поля ток содержит три компонента: одноэлектронный ток I_{single} , обусловленный туннелированием электронов (дырок), энергия которых, отчитываемая от уровня Ферми, выше $\Delta_c - eV$, где Δ_c щель в сверхпроводящем алюминии, а V – напряжение на СИН (соответственно, ниже), и двухчастичный подщелевой андреевский ток имеющий в обозначениях работы [1] составляющие I_n, I_s . При $V < \sim 0.5\Delta_c/2$ эти токи описываются выражениями [1,2,3]:

$$I_{single} = \left(\frac{1}{eR_n}\right)\sqrt{(2\pi k\Delta_c)}\exp\left(\frac{-\Delta_c}{kT_e}\right)\text{sh}\left(\frac{eV}{kT_e}\right)$$

$$I_{Andreev} = I_n + I_s = k_n \tanh\frac{eV}{2kT_{eff}} + k_s \frac{eV/\sqrt{(1 - eV/k\Delta_c)}}{k\Delta_c}$$

При $eV < kT$ основной вклад в ток вносит I_n , при увеличении напряжения с ним становится сравним ток I_s , а далее проявляется экспоненциально нарастающий одночастичный ток. Это позволяет экспериментально установить параметры, описывающие андреевский ток k_n, k_s и T_{eff} , которые заметно отличаются от значений, даваемых теорией [1].

При $eV < kT$ основной вклад в ток вносит I_n , при увеличении напряжения с ним становится сравним ток I_s , а далее проявляется экспоненциально нарастающий одночастичный ток. Это позволяет экспериментально установить параметры, описывающие андреевский ток k_n, k_s и T_{eff} , которые заметно отличаются от значений, даваемых теорией [1].

Как показано в работах [2,4], пленки алюминия в исследованных нами структурах, являются сверхпроводниками второго рода и глубина проникновения магнитного поля для них составляет примерно 300нм. Поэтому при поле, параллельном пленке алюминия толщиной 80нм у наших структур, оно практически однородно. Как оказалось, поле влияет на все составляющие тока. При этом функциональная зависимость тока от напряжения сохраняется и ВАХ можно описать теми же формулами, что и при нулевом токе.

Известны два подхода к описанию изменения тока I_n - увеличение T_{eff} в несколько раз [2], или уменьшение k_n [5]. Однако, если в первом случае при фитировании ВАХ параметр k_s монотонно незначительно уменьшается, то во втором он сначала возрастает примерно вдвое с максимумом при поле ~ 15 мТл, а при дальнейшем увеличении поля стремится к значению в нулевом поле. Это, на наш взгляд, говорит о том, что первый подход является предпочтительным.

Одноэлектронный ток возрастает в разы и становится доминирующим при меньших напряжениях. Поскольку магнитное поле не влияет на температуру, то это означает уменьшение щели с ростом поля по квадратичному закону. При 28мТл оно достигает $\sim 15\%$.

Литература

1. F. W. J. Hekking and Yu. V. Nazarov, Phys. Rev. B 49, 6847 (1994).
2. А. В. Селиверстов, М. А. Тарасов, В. С. Эдельман, ЖЭТФ, том 151, вып. 4, стр. 752 (2017).
3. Giaever, I.; Megerle, K. Phys. Rev., v. 122, p. 1101 (1961).
4. М.А. Тарасов, В. С. Эдельман, Письма в ЖЭТФ, том 101, вып. 11, с. 836 (2015).
5. T. Greibe, M.P.V. Stenberg, C. M. Wilson, T. Bauch, V. S. Shumeiko, and P. Delsing, PRL 106, 097001 (2011)

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ОСАЖДЕНИЯ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА УГЛЕРОДНЫХ ПОКРЫТИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ИОНОВ ФУЛЛЕРЕНОВ

Пуха В. Е.¹ Дроздова Е. И.², Лукина И. Н.², Черногорова О. П.², Петржик М. И.³,
Бельмесов А. А.¹

¹ФИЦ ПХФ и МХ РАН, Черноголовка, Россия, pve@icp.ac.ru

²ИМЕТ РАН, Москва, Россия, lukina.i.n@yandex.ru

³НИТУ МИСИС, Москва, Россия, mi_p@mail.ru

Создание сверхтвердых углеродных нанокompозитных покрытий, осажденных из ионов C_{60} , является перспективным для снижения коэффициента трения и износа трущихся пар. Покрытия на кремниевой подложке с температурой $T_s = 200$ и $300^\circ C$ получены из пучков ионов C_{60}^+ с энергией 7 кэВ, а также из смешанных пучков, в которых дополнительно присутствовали ионы C_{60}^{++} (~22%) и C_{60}^{+++} (~1,5%) с энергией 14 и 21 кэВ, соответственно. Спектр КРС для всех покрытий представляет собой широкую полосу в интервале $1000-1800\text{ см}^{-1}$, типичную для структур аморфного углерода. При повышении температуры подложки соотношение интенсивностей D и G пиков $I(D)/I(G)$ повышается у спектров покрытий, полученных как из однозарядных, так и смешанных ионов C_{60} , что указывает на упорядочение (кластеризацию) структуры покрытия, связанную с процессом графитизации. Это подтверждается снижением ширины G пика на половине высоты (FWHM(G)), которая характеризует степень беспорядка в покрытии. Указанный эффект возрастает с повышением энергии ионов, использованных для получения покрытия. Механические и трибологические свойства покрытий, осажденных из однозарядных ионов, при повышении температуры подложки меняются незначительно. Такие покрытия демонстрируют высокие характеристики индентирования (твердость $H_{IT} = 50-52$ ГПа, модуль $E_{IT} = 255-265$ ГПа и упругое восстановление $\eta_{IT} = 85-86\%$) и близки по трибологическим свойствам. Покрытия из смешанных пучков, в которых присутствуют высокоэнергетические ионы, имеют более низкие механические характеристики и очень сильно реагируют на повышение температуры по трибологическим свойствам: коэффициент трения значительно снижается (от 0,17 до 0,05), а износостойкость ухудшается. Такой эффект обусловлен увеличением степени графитизации при дополнительном нагреве как вследствие повышения температуры подложки, так и из-за прироста энергии исходных ионов C_{60} .

Исследования выполнены по теме Государственного задания, № государственной регистрации АААА-А19-119061890019-5, темкарта 00892019-007 и Государственного задания 075-01176-23-00.

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ БАРЬЕРЫ ДЛЯ ПЕРЕМАГНИЧИВАНИЯ АТОМНЫХ ЦЕПОЧЕК ИЗ Co НА ПОВЕРХНОСТИ $\text{Pt}(664)$ С УЧЕТОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЗЯЛОШИНСКОГО МОРИЯ.

Сапронова Е.С.

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
Физический факультет, Москва, Россия
E-mail: sapronova.es18@physics.msu.ru*

В современном мире изучение атомных цепочек является важной и многообещающей задачей. В перспективе использование атомных цепочек возможно в квантовых компьютерах, квантовых коммуникациях, а также в качестве элементов хранения информации нового типа. Интерес изучения атомных цепочек значительно возрос после открытия гигантской магнитной анизотропии атомов из Co на поверхности Pt [1].

Энергетические барьеры для перемагничивания цепочек из Co конечного размера на поверхности $\text{Pt}(664)$ рассчитаны с учетом взаимодействия Дзялошинского-Мория. Для численных расчетов используется геодезический метод подталкивания упругой лентой [2]. Параметры эффективного гамильтониана цепочки взяты из работы [3]. Установлено, что основные состояния таких цепочек атомов неколлинеарны. Перемагничивание коротких цепочек атомов происходит без образования доменных стенок. В то же время для более длинных цепочек существует два неэквивалентных способа перемагничивания — формирование доменной стенки в направлении по часовой стрелке (CDW) и доменной стенки против часовой стрелки (ACDW) [4]. Формирование ACDW является энергетически более выгодным. Показано, что при увеличении длины цепочки может возникнуть дополнительное метастабильное состояние, соответствующее расположению ACDW в середине цепочки атомов. Изменение параметров гамильтониана показывает, что перемагничивание через образование CDW может происходить только в некоторой области параметров. Исследовано также влияние диполь-дипольного взаимодействия на энергетические барьеры перемагничивания. Показано, что большинство представленных результатов можно удовлетворительно объяснить в рамках XY-модели. Магнитные конфигурации цепочки атомов вблизи локальных минимумов и седловых точек могут быть аппроксимированы простыми аналитическими функциями.

Данная работа поддержана стипендией Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» для студентов, поступающих в 2022 году в магистратуру Физического факультета МГУ им. М.В.Ломоносова. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант №21-72-20034).

Литература

- 1. Gambardella P, Rusponi S, Veronese M, Dhessi S S, Grazioli C, Dallmeyer A, Cabria I, Zeller R, Dederichs P H, Kern K, Carbone C, Brune H, Giant magnetic anisotropy of single cobalt atoms and nanoparticles, *Science*, vol. 301, pp. 1130–1133 (2003)
- 2. Bessrab P F, Uzdin VM, Jónsson H, “Method for finding mechanism and activation energy of magnetic transitions, applied to skyrmion and antivortex annihilation,” *Comput. Phys. Commun.*, vol. 284, pp. 335–347 (2015)
- 3. Schweflinghaus B, Zimmermann B, Heide M, Bihlmayer G, Blügel S, Role of Dzyaloshinskii-Moriya interaction for magnetism in transition-metal chains at Pt step edges, *Phys. Rev. B*, vol. 93, 044411 (2016)
- 4. Kolesnikov S.V., Sapronova E.S., Influence of Dzyaloshinskii–Moriya and Dipole–Dipole Interactions on Spontaneous Magnetization Reversal Time of Finite-Length Co Chains on Pt(664) Surfaces, *IEEE Magnetics Letters*, (2022)

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ТЕТРА-ПИРИДИЛ-ПОРФИРИНА И ПРЯМОЕ МЕТАЛЛИРОВАНИЕ РТ: ИССЛЕДОВАНИЯ МЕТОДОМ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Можчи́ль Р.Н.¹, Ионо́в А.М.¹, Божко С.И.¹, Божко В.С.¹, Во́лыхов А.А.², Яши́на Л.В.²,

¹ ИФТТ РАН, Черногoловка, Россия, mr_mozhchil@mail.ru

² МГУ, Москва, Россия

Органические молекулярные пленки порфиринов являются перспективными комплексами из-за своих физико-химических свойств с потенциальным применением в синтезе наноматериалов и нанoeлектронных устройствах. Одним из наиболее интересных свойств этих соединений это изменение электронных и спиновых состояний порфиринов по средствам оптического возбуждения и введения носителей заряда. Для понимания и управления их свойств требуются знания их электронной и атомной структуры[1].

В настоящей работе проведено исследование тетра-пиридил-порфирина методом фотоэлектронной спектроскопии с применением синхротронного излучения.

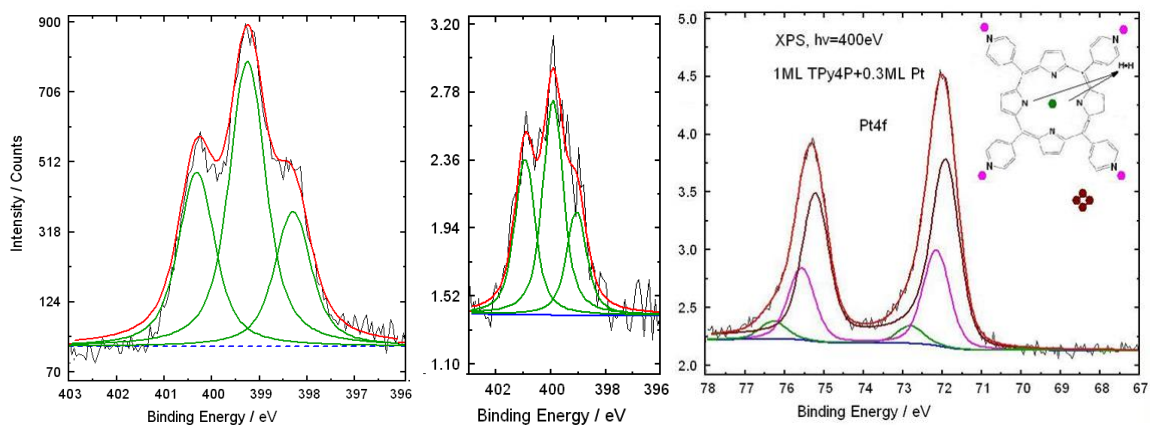


Рис 1. Разложение РФС спектров основного уровня N1s, Pt4f ТРy4P на компоненты. Слева – область N1s ТРy4P, термически осажденный на $\text{Bi}_2\text{Te}_3(21\text{\AA})$, в центре и справа – область N1s, Pt4f ТРy4P после напыления 0.4 монослоя платины.

В спектрах основных уровней N1s состояний наблюдается 3 линии, соответствующие азоту в пирро-, аза- и пиридил- группах соединений(рис. 1). При напылении мультислойных пленок порфиринов на платиновый подслоя обнаружено заметное изменение в спектрах N1s состояний и несколько состояний Pt4f, что является аргументом в пользу возможности прямого металлизации соединения при комнатной температуре в сверхвысоком вакууме.

Литература

1. Белогорохов А.И., Божко С.И., Ионо́в А.М., Чайка А. Н., Трофимов С.А., Румянцева В.Д., Вялых Д.// ПОВЕРХНОСТЬ. РЕНТГЕНОВСКИЕ, СИНХРОТРОННЫЕ И НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ. - 2009. - №12. С. - 18-23.

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК СПЛАВА $\text{Pd}_{1-x}\text{Co}_x$ ($x = 0.01-0.08$)

Гумаров А. И.^{1,2}, Янилкин И. В.^{1,2}, Столяров В. С.³, Киямов А. Г.¹, Юсупов Р.В.¹,
Хайбуллин Р. И.², Тагиров Л. Р.²

¹Казанский федеральный университет, Казань, Россия, amir@gumarov.ru

²Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ КазНЦ РАН,
Казань, Россия, ltagirov@mail.ru

³Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия, Stolyarov.vs@phystech.edu

Впервые проведено систематическое исследование магнитных свойств тонких пленок сплава Pd-Co с содержанием примеси кобальта до 8 ат.%. В работе методом МВЕ была выращена серия образцов, эпитаксиальных (на MgO) и поликристаллических (на Si) тонких пленок сплава Pd-Co с толщиной в диапазоне 5–50 нм. Структурные свойства исследовались методами XRD, XPS и LEED. Особенности магнитных свойств исследовались методами VSM и FMR при различной геометрии приложенного поля в диапазоне температуры 5–300 К. Исследовано влияние вакуумного отжига на структурные и магнитные свойства синтезированных образцов. Исследовано влияние толщины пленки и концентрации примеси кобальта на магнитную анизотропию, температуру перехода и намагниченность. Установлено, что температура Кюри (T_C) существенно зависит от концентрации кобальта и изменяется как ~ 40 К/% примеси. Установлено, что пленки сплава Pd-Co, с содержанием примеси кобальта вплоть до 6 ат.% обладают ярко выраженной перпендикулярной магнитной анизотропией, не зависимо от типа подложки (MgO или Si) и толщины пленки (рис. 1). Показано, что сплав Pd-Co, как и Pd-Fe [1], с низкой концентрацией магнитной примеси, является слабым ферромагнетиком, однако, обладает значительно большей коэрцитивностью, и такой сплав может быть использован в качестве закрепленного ферромагнитного слоя в наноструктурах типа сверхпроводящий «спиновый клапан».

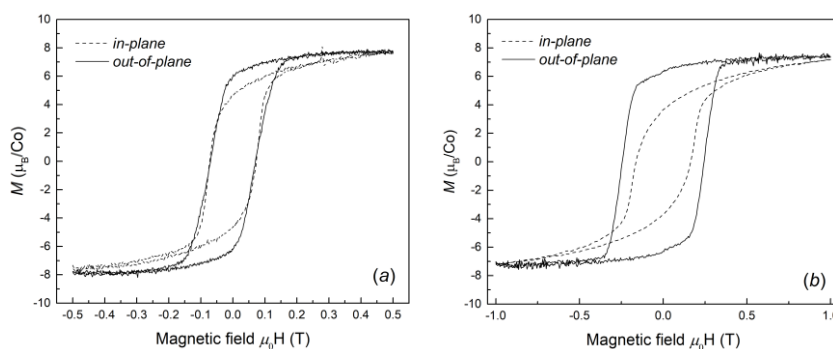


Рис.1. Петли магнитного гистерезиса, измеренные при 5К и различной ориентации приложенного магнитного поля, для эпитаксиальной (а) и поликристаллической (б) пленок сплава Pd-Co толщиной 50 нм с содержанием примеси Co 3 ат.%.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00629, <https://rscf.ru/project/22-22-00629/>

Литература

1. Esmaili A., Yanilkin I., Gumarov A., Vakhitov I., Gabbasov B., Yusupov R., Tatarsky D., Tagirov L. // Sci. China Mater. – 2020. – V64. – No 5. – P. 1246-1255.

ЭЛЕКТРОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОМЕЩЕННЫХ НА ПОДЛОЖКИ ДИАМАНОВ ДЛЯ ПРИЛОЖЕНИЙ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

Грекова А. А.^{1,2}, Гришаков К. С.^{1,2}, Меринов В. Б.^{1,2},
Маслов М. М.^{1,2}, Катин К.П.^{1,2}

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

²Научно-исследовательский институт проблем развития научно-образовательного
потенциала молодежи, Москва, Россия

aagreкова@inbox.ru

Графен представляет собой двумерный кристалл, образованный изолированным графитовым слоем. У графена отсутствует диэлектрическая щель между валентной зоной и зоной проводимости, т.е. по сути, он является бесщелевым полупроводником. Два графеновых листа, связанных между собой слабым ван-дер-ваальсовым взаимодействием, способны формировать двуслойный графен или биграфен. При возникновении ковалентного связывания между слоями с последующим гидрированием поверхности образуется наноструктура типа C_2H , которую принято называть алмазном [1]. При этом в зависимости от изначальной ориентации слоев в биграфене алмаз может формировать различные типы упаковок, такие как AA, AB и различные муаровые структуры [2]. Можно считать, что алмаз представляет собой тонкую алмазную пленку толщиной менее одного нанометра. Ширина запрещенной зоны Δ_{BG} алмаза меньше, чем у алмаза.

В настоящей работе с помощью компьютерного моделирования проводится анализ электронных характеристик AA и AB алмазов, помещенных на различные подложки: металлические Ni(111), диэлектрические h -BN (гексагональный нитрид бора), а также композиты типа Ni(111)/BN. Вычисления выполнялись в рамках теории функционала плотности в программе Quantum Espresso. Были получены электронные зонные структуры и плотности электронных состояний. Установлено, что присутствие нитрида бора уменьшает Δ_{BG} , в то время как металлическая подложка в композите приводит к полному исчезновению запрещенной зоны. Так для свободного AA алмаза и алмаза на BN подложке Δ_{BG} составила 3.68 и 3.49 эВ соответственно. В случае же с AB упаковкой эти значения оказались равными 4.0 и 3.14 эВ для свободного и помещенного на подложку алмаза соответственно. Кроме того, в процессе выполнения работы получены инфракрасные и рамановские спектры для свободных алмазов и алмазов на нитриде бора. Установлено, что характеристические пики на спектрах соответствуют колебаниям валентных связей между атомами водорода и углерода, а также между атомами азота и бора, что может быть использовано в дальнейшем для экспериментальной идентификации алмазов, помещенных на диэлектрические подложки.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-22-00179. Авторы благодарят Научно-исследовательский институт Проблем развития научно-образовательного потенциала молодежи за предоставленные вычислительные ресурсы и всестороннюю поддержку исследования.

Литература

1. Чернозатонский Л.А., Сорокин П.Б., Квашнин А.Г., Квашнин Д.Г. // Письма в ЖЭТФ. - 2009. - № 90. - С. 144-148.
2. Chernozatonskii L.A., Katin K.P., Demin V.A., Maslov M.M. // Applied Surface Science - 2021. - V. 537. - P. 148011.

ГРАДИЕНТ ТЕМПЕРАТУРЫ КАК СПОСОБ УПРАВЛЕНИЯ РОСТОМ ОДНОМЕРНЫХ НАНОСТРУКТУР НА СТУПЕНЧАТЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ

Сыромятников А.Г.^{1,2}, Кудряшов С.А.¹, Клавсюк А.Л.¹, Салецкий А.М.¹

¹*МГУ им. М.В. Ломоносова, Физический факультет, Москва, Россия,*

ag.syromyatnikov@physics.msu.ru

²*ФИЦ ХФ РАН им. Н.Н. Семенова, Москва, Россия*

Необычные свойства одномерных наноструктур привлекают внимание исследователей из различных областей химии, физики и материаловедения. Причиной тому является потенциальная возможность использования их в составе новых микроэлектронных устройств. Для того, чтобы это стало возможным, необходимо способ создавать массивы одномерных наноструктур с большими скоростью и точностью. Одним из важных свойств таких массивов является их высокая упорядоченность.

При помощи кинетического метода Монте-Карло были исследованы процессы напыления и дальнейшего формирования одноатомных металлических наночастиц на вицинальных (ступенчатых) металлических поверхностях. Наличие доступных экспериментальных данных [1,2] для сравнения расчета с экспериментом определило выбор систем Ag/Pt и Co/Cu. Длина цепочки является случайной величиной, т.е. в равновесном состоянии вероятность обнаружить цепочку определенной длины в таких системах монотонно уменьшается с ростом длины цепочки [1-4].

Моделирование показало, что эволюция атомных цепочек происходит по-разному в зависимости от того, нагревается система или остывает [3,4]. При температуре выше критической система быстро достигает термодинамического равновесия. Однако ниже нее система остается в неравновесном состоянии, так как мобильность адатомов по поверхности оказывается существенно снижена.

Возможность управлять распределением длин наночастиц появляется при установлении градиента температуры в направлении, параллельном краю террас [5]. Это ведет к нарушению случайности процесса формирования наночастиц, и формирование цепочек продолжается на «холодной» стороне поверхности. Для наблюдения описанного эффекта необходимо, чтобы крайние точки градиента температуры лежали по разные стороны от значения критической температуры.

Литература

1. P. Gambardella, H. Brune, K. Kern, and V. I. Marchenko // *Phys. Rev. B.* – 2006. – Vol. 73. – P.245425.
2. N. Zaki, D. Potapenko, P. D. Johnson, and R. M. Osgood // *Phys. Rev. B.* – 2009. – Vol. 80. – P. 155419.
3. A. G. Syromyatnikov, M. R. Guseynova, A. M. Saletsky, A. L. Klavsyuk // *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment.* — 2020. — Vol. 2020, no. 9. — P. 093202.
4. А. Г. Сыромятников, С. А. Кудряшов, А. М. Салецкий, А. Л. Клавсюк // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* — 2021. — Т. 160, № 3. — С. 410–414.
5. A. G. Syromyatnikov, S. A. Kudryashov, A. M. Saletsky, A. L. Klavsyuk // *Chemical Physics Letters.* — 2022. — Vol. 802. — P. 139796.

САМОДИФФУЗИЯ В ГРАНИЦАХ ЗЕРЕН В НАНОКРИСТАЛЛЕ НИОБИЯ: АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Ступак М.Е. 1, Уразалиев М.Г. 1, Попов В.В. 1

¹Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения, г. Екатеринбург, Россия, E-mail: shay92@yandex.ru

Диффузия в границах зерен (ГЗ) является важной для стабильности структуры поликристаллов, так как она напрямую связана с такими процессами, как ползучесть, рост зерна и рекристаллизация, сверхпластичность и спекание. Моделирование процессов зернограницной самодиффузии дополняет экспериментальные исследования диффузии в ГЗ и делает возможным построение физической теории зернограницной диффузии.

В данной работе методом прямой молекулярной динамики были рассчитаны эффективные коэффициенты самодиффузии в нанокристалле ниобия. Зернограницная самодиффузия рассчитана на основании средне-квадратичного смещения атомов в области ГЗ и представлена в виде температурной зависимости. Для выполнения данной задачи использовалась программа LAMMPS [1]. Атомистическое взаимодействие атомов ниобия описывалось с помощью потенциала погруженного атома [2]. Нанокристалл построен на основе алгоритма Вороного в программе ATOMSK [3]. Зерна в нанокристалле разориентированы случайным образом, средний размер зерна составляет 7.5 нм. Блок моделирования содержит около 600000 атомов ниобия. Полученную модель нанокристалла (Рис. 1) нагревали и подвергали выдержке при постоянной температуре (отжигу) в рамках классической МД. Необходимая температура контролировалась термостатом Нозе-Гувера в изотермо-изобарическом ансамбле.

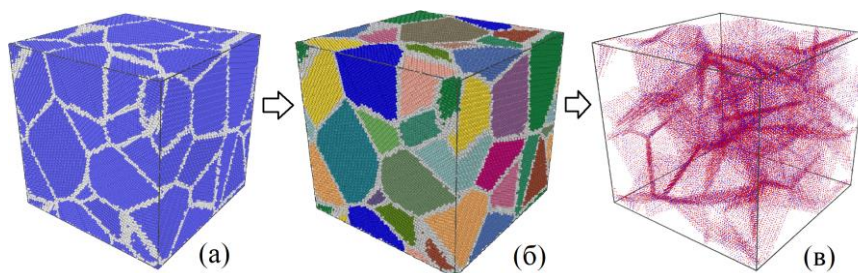


Рис. 1. Модель нанокристалла ниобия (а) с сегментированными зёрнами (б) и отсеченные атомы в области ГЗ (в).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-13-00063, <https://rscf.ru/project/21-13-00063>.

При проведении работ был использован суперкомпьютер «Уран» ИММ УрО РАН

Литература

1. S. Plimpton, J. Comp Phys 117, 1-19 (1995).
2. Y. Zhang, R. Ashcraft, M.I. Mendeleev, C.Z. Wang, and K.F. Kelton (2016), "Experimental and molecular dynamics simulation study of structure of liquid and amorphous Ni62Nb38 alloy", *The Journal of Chemical Physics*, **145(20)**, 204505. DOI: [10.1063/1.4968212](https://doi.org/10.1063/1.4968212).
3. Pierre Hirel, Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files, Computer Physics Communications, 2015, V 197, P. 212-219, <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.07.012>.

ТЕРМОСТАБИЛЬНЫЙ СИТАЛЛ НА ОСНОВЕ СИСТЕМЫ $\text{Li}_2\text{O}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$ **Наумов А. С., Алексеев Р. О., Савинков В. И., Сигаев В. Н.***Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
Москва, Россия, naumov.a.s@muctr.ru*

Стремительное развитие оптических материалов для электроники, оптоэлектроники и фотоники создает условия для создания новых и совершенствования известных приборов, в том числе для нужд астрономии, позволяющие получать изображения с высоким разрешением из самых дальних уголков вселенной. Независимо от того, базируются ли эти приборы на земле или на борту спутников, их оптическая система должна обладать исключительной точностью даже при незначительном изменении температур. Выбор конструкционных материалов–диэлектриков в этой связи ограничен изделиями на основе кварцевого стекла и литиевоалюмосиликатных (ЛАС) ситаллов, обладающих значениями температурного коэффициента линейного расширения (ТКЛР) близкими к нулю и способных сохранять стабильность оптических, термических и механических характеристик в условиях сверхвысоких статических, динамических и тепловых нагрузок.

Получаемые по относительно дешевой стекольной технологии, ситаллы могут оптимально сочетать в той или иной степени свойства кристаллов и стекол. Выделяющиеся в объеме ЛАС ситаллов кристаллические соединения алюмосиликатов лития, такие как твердые растворы β -эвкриптита и β -сподумена, обладают отрицательными величинами ТКЛР, что в сочетании с тепловым расширением остаточной стеклофазы позволяет прецизионно регулировать ТКЛР вблизи нулевых значений в широком температурном интервале [1]. Основное внимание в разработках последних лет уделяется улучшению технологических свойств ситалловых стекол и достижению более стабильных значений ТКЛР, в первую очередь за счет совершенствования тонкокристаллической структуры ЛАС ситаллов путем оптимизации состава, введения добавок оксидов нуклеаторов и температурно-временных режимов кристаллизации [2].

В настоящей работе изучены процессы катализированной кристаллизации стекол многокомпонентного состава на основе системы $\text{Li}_2\text{O}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$. Температурно-временные параметры зарождения центров кристаллизации в объеме стекол были определены согласно методике А. Маротта и др. [3]. Методами дилатометрического и рентгенофазового анализа, а так же электронной микроскопии определены режимы тонкой регулировки ТКЛР вблизи нулевых значений в интервале температур от -50 до 400 °С.

Работа выполнена при финансовой поддержке РХТУ им. Д.И. Менделеева, прикладной научно-исследовательский проект молодых штатных работников РХТУ им. Д.И. Менделеева в рамках программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030» №ВИГ-2022-090.

Литература

1. Bach H., Krause D. (ed.). Low Thermal Expansion Glass Ceramics, Berlin, Heidelberg, Springer. – 2005. – P. 121–235.
2. Mitra I. ZERODUR: a Glass-Ceramic Material Enabling Optical Technologies // Opt. Mater. Express. – 2022. – V. 12. – No. 9. – P. 3563-3576.
3. Marotta A. et al. Nucleation and crystal growth in $\text{Na}_2\text{O}\cdot 2\text{CaO}\cdot 3\text{SiO}_2$ glass: a DTA study // Thermochemica Acta. 1981. Vol. 46, No. 2, P. 123-129.

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА
КВАЗИДВУМЕРНОГО ОКСИДА
 $\text{Li}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$**

Н. С. Фокин¹, А. Е. Суслопарова², А. И. Курбаков³

ФГБУ «ПИЯФ» им. Б. П. Константинова НИЦ «Курчатовский институт», Гатчина,
Россия

¹ E-mail: Fokin_ns@pnpi.nrcki.ru

² E-mail: Susloparova_ae@pnpi.nrcki.ru

³ E-mail: Kurbakov_ai@pnpi.nrcki.ru

Квазидвумерные оксиды находят широкое применение в области катализа [1], электрохимии (в качестве электролитов) и оптики, благодаря широкому спектру физических свойств и особенному строению. С фундаментальной точки зрения, благодаря сотовому упорядочению магнитной подрешетки, данный класс соединений приобретает широкий спектр интересных магнитных свойств.

В настоящей работе, методом нейтронной дифракции изучено кристаллическое строение сотового фрустрированного магнетика стехиометрического состава $\text{Li}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$, полученного из двух прекурсоров: $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$ и $\text{K}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$.

Серия экспериментов проводилась на нейтронном порошковом дифрактометре G4.1 (LLB, Сакле, Франция) в диапазоне температур 1.5-35К с шагом 5К. Длина волны монохроматического излучения составила 2.4283Å. Эксперимент выполнялся с использованием фокусирующего монохроматора на основе пирографита (hkl = 002).

Обработка полученных экспериментальных данных осуществлялась с применением полнопрофильного анализа методом Ритвельда в программном пакете FullProf.

В результате работы были установлены особенности кристаллической структуры выбранных соединений. Вне зависимости от выбранного прекурсора, оба образца кристаллизуются в ромбическую пространственную группу *Smca*. Данная структура относится к типу T2, (где T-тетраэдрическая координация щелочного иона, 2-период повторяемости слоев при данной упаковке). В направлении оси *c* происходит чередование немагнитных слоев с магнитными, которые состоят из ионов Ni^{2+} и Te^{6+} , причем ионы никеля и теллура окружены шестью атомами кислорода, формируя сообразную структуру. Подобная кристаллическая упаковка может стать причиной возникновения дальнего магнитного порядка при низких температурах.

У образца, полученного из $\text{Na}_2\text{Ni}_2\text{TeO}_6$, была обнаружена примесная фаза (16 вес. %) того же стехиометрического состава, имеющая моноклинные искажения и кристаллизующаяся в пространственную группу *C2/m*. Параметры ячейки, валентные углы и расстояния между атомами в сравнении между образцами имеют незначительные отличия.

Данная работа является началом цикла, посвященного изучению особенностей магнитной структуры данного типа соединений с сотообразной геометрией магнитной подрешетки. Уточненные кристаллографические данные позволят перейти к работе с магнитной структурой при более низких температурах.

1. Kadari R., Velchuri R., Sreenu K et al. // Mater. Res. Express. 2016. V. 3. P. 115902.

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ КЕРАМИК И МОНОКРИСТАЛЛОВ ИТТРИЙ-АЛЮМИНИЕВЫХ ГРАНАТОВ

Григорьев А.Ю.¹, Рошин Б.С.¹, Фёдоров В.А.¹, Асадчиков В.Е.¹, Бузмаков А.В.¹,
Кравцов А.А.²

¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия,
grigoriev.a@crys.ras.ru

²Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, Россия

Регистрация изображений быстрых процессов в рентгеновском диапазоне, с временным разрешением ~1 мс и меньше, - задача, которая набирает актуальность в исследованиях биологических объектов. Если решение данной задачи для синхротронного излучения в силу его высокой интенсивности уже существует и применяется, то для лабораторных источников такого решения нет. Одно из возможных направлений решающих такую проблему – сцинтилляционные детекторы, использующие в качестве люминофора иттрий-алюминиевых гранатов допированных церием (YAG:Ce). Данный материал, согласно теории, обладает малым временем высвечивания, позволяющим фиксировать быстрые процессы, высоким световыходом и спектром излучения, хорошо согласующимся со спектром поглощения кремния, основного материала матриц детекторов.

Помимо выбора материала необходимо также определить его вид: монокристалл, порошок, керамика. Для этого были проведены исследования монокристаллов и керамик YAG:Ce. Спектры высвечивания при их облучении рентгеновским излучением были получены на специально сконструированной установке во ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН. Она состоит из рентгеновской трубки с вольфрамовым анодом, защитного кожуха, регулируемого столика для образцов, апертуры диаметром 4 мм и конденсора, расположенного на световоде оптического спектрометра. При облучении рентгеновским излучением керамик YAG:Ce в начале наблюдался рост интенсивности переизлучения керамик во всем диапазоне видимого спектра. Однако в дальнейшем интенсивность начала спадать, что не фиксировалось в ранее изучаемых образцах.

В работе представлено сравнительное исследование интенсивностей и спектров монокристаллов и керамик YAG:Ce. Изучены возможности применения монокристаллов и керамик YAG:Ce в качестве сцинтилляторов для рентгеновских детекторов.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части проведения рентгеновских томографических исследований.

Исследования выполнены с использованием образцов, синтезированных в рамках государственного задания Северо-Кавказского федерального университета № 075-01281-22-05 с использованием ресурсов центра коллективного пользования Северо-Кавказского федерального университета

ЯМР ^{175}Lu В СВЕРХПРОВОДНИКЕ LuB_{12} .

О. М. Вяселев¹, А. А. Гиппиус^{2,3}, Н. Е. Случанко⁴, Н. Ю. Шицевалова⁵,
В. Б. Филиппов⁵

¹ ИФТТ РАН, Черноголовка, vyasel@issp.ac.ru

² Физический факультет МГУ им. Ломоносова, Москва

³ ФИАН, Москва, gippius@mail.ru

⁴ ИОФ РАН, Москва, nes@lt.gpi.ru

⁵ ИПМ НАНУ, Киев, Украина, nshitsevalova@gmail.com

Методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР) на ядрах ^{175}Lu исследован сверхпроводник LuB_{12} с целью изучения связанной с динамическим эффектом Яна-Теллера решёточной нестабильности как вероятной причины низкой $T_C \approx 0,4$ К (по сравнению с ZrB_{12} , где $T_C \approx 6$ К) [1]. В идеальной кубической решётке LuB_{12} , группа $Fm\bar{3}m$, атом Lu занимает центрально-симметричную позицию. Благодаря большому квадрупольному моменту ядра ^{175}Lu (спин 7/2) его спектр ЯМР очень чувствителен к дефектам кристаллической структуры: при нарушении кубической симметрии частота “сателлитных” переходов ($\pm 7/2 \leftrightarrow \pm 5/2$, $\pm 5/2 \leftrightarrow \pm 3/2$, $\pm 3/2 \leftrightarrow \pm 1/2$) обретает квадрупольный сдвиг в I порядке теории возмущений. При наличии случайных дефектов это приводит к уширению линии, что служит мерой дефектности решётки.

Спектр ЯМР ^{175}Lu в LuB_{12} представлен суммой “узкого” и “широкого” пиков лоренцевой формы (рис 1). Узкий пик соответствует “центральному” переходу $+1/2 \leftrightarrow -1/2$, а широкий — “сателлитам”. Температурная зависимость ширины “широкой” линии $\Delta_{1/2}$ имеет гистерезисный характер (рис.2). Рост $\Delta_{1/2}$ при охлаждении до 150К указывает на усиление дефектности решётки — эскалацию решёточной нестабильности. При дальнейшем охлаждении $\Delta_{1/2}$ сужается, что можно связать с формированием устойчивой низкотемпературной конфигурации дефектов, которая монотонно распадается при нагревании, определяя температурный гистерезис $\Delta_{1/2}$.

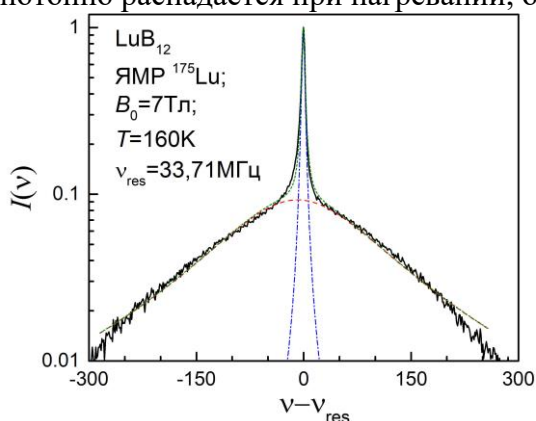


Рис.1 Спектр ^{175}Lu в LuB_{12} .

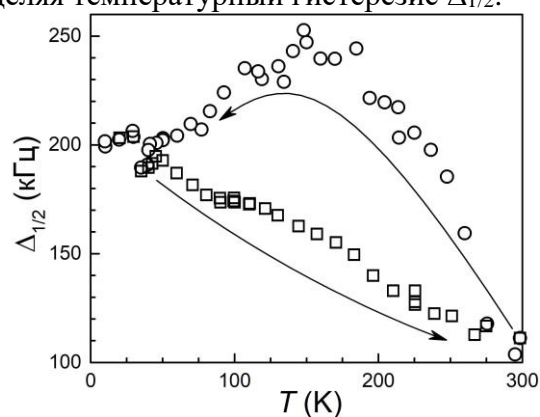


Рис.2 Температурная зависимость ширины “широкого” пика ^{175}Lu в LuB_{12} .

Спин-решёточная релаксация ^{175}Lu при $T < 25$ К линейна по T , что характерно для магнитной релаксации через электроны проводимости. При $25 < T < 140$ К доминирует вклад со щелевым характером $\exp(-204/T)$, а при $T > 140$ К — степенной T^4 . Эти вклады, по-видимому, связаны с квадрупольным механизмом релаксации.

Литература

1. А. Azarevich *et al.* // Phys. Rev. B. – 2021. – Т. 103. – С. 104515.

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ВЕЛИЧИНУ МЕЖСЛОЕВОГО ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ Co/Pd/Co

Шашков И. В., Евстигнеев Р. С., Кабанов Ю. П., Горнаков В. С.

Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия
shav@issp.ac.ru

С использованием Керр-микроскопии исследован процесс перемангничивания гетероструктуры Ta(2нм)/Pd(1нм)/Co(0,4нм)/Pd(6нм)/Co(0,4нм)/Pd(1нм)/Ta(2нм) в диапазоне температур от 15 К до 300 К. Эта структура была нанесена магнетронным напылением на окисленную кремниевую подложку площадью 5x5 мм² при комнатной температуре. Процессы перемангничивания ферромагнитных слоев (ФМ) в таких гетерофазных пленках обусловлены обменным взаимодействием J между слоями [1].

Получена температурная зависимость поля зарождения доменов в намагниченном до насыщения образце (рис.1). Показано, что поле зарождения в обоих ФМ слоях монотонно убывает с ростом температуры. Обнаружена область неустойчивых температур $160\text{K} < T < 172\text{K}$ ниже которой сквозные домены новой фазы зарождаются одновременно в обоих слоях, тогда как в данной области зарождение доменов в разных слоях происходит также одновременно, но в разных местах образца. В этом случае подвижность доменных границ (ДГ) существенно различаются. При $T_{CR} > 172\text{K}$ зарождение доменов происходит в разных полях, что позволило выявить полевые зависимости скорости движения ДГ V в одном из ФМ слоев при различных температурах (Рис.2).

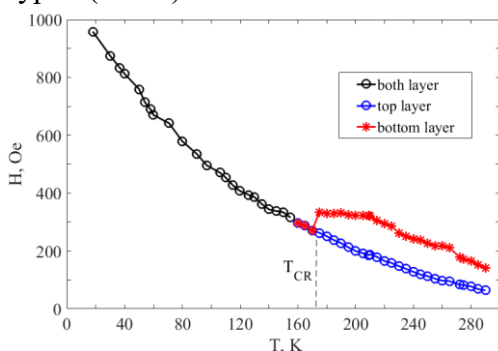


Рис.1 Поле зарождения доменов в ФМ слоях трехслойной структуры Co/Pd/Co.

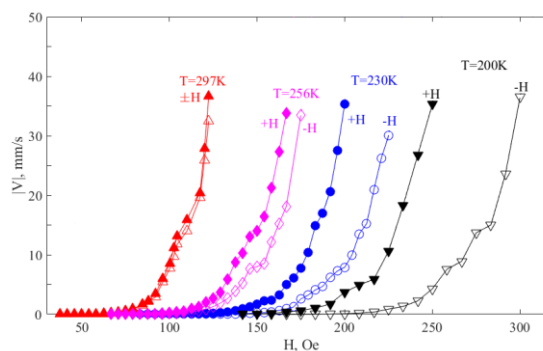


Рис.2 Зависимость скорости доменной границы от внешнего магнитного поля в ФМ слое при различных температурах.

Установлено, что при $T=297\text{K}$ зависимости скоростей при движении ДГ в противоположных направлениях (при $+H$ и $-H$) совпадают, тогда как с понижением температуры эти зависимости расходятся, причем тем сильнее, чем ниже T . Показано, что на ДГ при ее движении кроме внешнего поля действует эффективное поле H_J межслоевого обменного взаимодействия, которое увеличивает или уменьшает давление на ДГ в зависимости от складывается это поле с внешним полем или вычитается из него. Анализ данных результатов $V(H, T)$ позволил получить зависимость межслоевого обменного взаимодействия $J(T) = 2M \cdot H_J(T)/b$ от температуры, где M и b – намагниченность и толщина каждого слоя, соответственно. Установлена величина межслоевого обмена, при которой наблюдается переход от несвязанного перемангничивания слоев к связанному.

Литература

1. Shashkov I.V., Kabanov Yu.P., Tikhomirov O.A., and Gornakov V.S.// Magnetism. – 2022. – № 2. – P. 186–194.

ПОЛОСЫ СДВИГА В АМОРФНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВАХ**Аронин А.С.***Институт физики твердого тела им. Ю.А.Осипьяна Российской академии наук,
Черноголовка, Россия*

Исследованы полосы сдвига, образующиеся при деформации в аморфных сплавах на основе алюминия, железа, циркония и их связь со ступеньками на поверхности. Образование полос сдвига – мест локализации пластической деформации, в которых повышена концентрация свободного объема и, следовательно, подвижность атомов, часто вызывает формирование нанокристаллов непосредственно в полосах или их окрестности. Деформация сплавов осуществлялась при комнатной температуре методами многократной прокатки, сжатия, кручения под давлением. Локальные особенности структуры и состава аморфных сплавов после деформации и при образовании нанокристаллов исследованы методами зондовой микроскопии и рентгеновского микроанализа (в геометрии на просвет и отражение), просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии. Показано, что полосы сдвига начинаются на поверхностной ступеньке. Определены размеры полос сдвига. Показано, что толщина полос сдвига колеблется в диапазоне от 5 до 50 нм и может иметь разную толщину в отдельных участках. В прокатанных образцах обнаружены вторичные полосы сдвига, расположенные под углом к первичным полосам, выходящим на поверхность. Участки полосы сдвига имеют светлый и темный электронно-микроскопический контраст, что свидетельствует об изменении плотности аморфной фазы вдоль полосы сдвига. Ступеньки на поверхности имеют сложную форму и состоят из элементарных ступенек. Толщина элементарных ступенек соответствует толщине полосы сдвига. Высота минимальных ступенек колеблется от нескольких десятых нм до 1.5 нм. Ступеньки, формирующиеся при деформации на поверхности, имеют существенно больший размер и образуются при действии нескольких полос сдвига, расположенных в разных плоскостях. Обсуждаются причины наблюдаемых особенностей структуры.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФ (грант № 23-22-00122).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРА ГРЮНАЙЗЕНА ИЗ ОСНОВНОГО ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО КАЛИБРОВОЧНОГО СООТНОШЕНИЯ

Христов А.В., Червинский Д.А., Шелест В.В.

*ГБУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина», г.Донецк, РФ
efbji@list.ru*

Принципиальная нелинейность упругих свойств конденсированных сред обеспечивается ангармонизмом межатомного (межмолекулярного) взаимодействия. Ангармонизм заключается в отклонениях колебаний осцилляторов в системе от гармонического закона.

Для твердых тел мерой ангармоничности сил, действующих между атомами и молекулами, являются коэффициент теплового расширения α и параметр Грюнайзена γ_G . Они определяют целый ряд важных физических процессов, таких как тепловое расширение, теплопроводность, поглощение звуковых волн, температурную и барическую зависимость упругих свойств.

Рассматривая однородное изотропное твердое тело, были выведены соотношения (в которые входит параметр Грюнайзена) из основного термодинамического калибровочного соотношения:

$$\frac{\partial(P, V)}{\partial(T, S)} = 1. \quad (1)$$

Калибровочное соотношение можно рассматривать не только с методической точки зрения, но и как условие неаномальности поведения термодинамических систем в области фазовых переходов. Любое отклонение якобиана (1) от калибровочной единицы ведет к нарушению всех зависимостей для термодинамических коэффициентов (в том числе коэффициента теплового расширения).

Работая с (1) и с термодинамическими уравнениями состояний можно получить обширный набор выражений для всех термодинамических коэффициентов: используя термодинамические переменные термического (T, S) и механического (P, V) типа переходя методом якобианов от одних переменных к другим. Таким образом, используя калибровочное соотношение (1) вывели наряду с набором из восемнадцати выражений для термодинамических коэффициентов и следующее нетривиальное выражение, содержащее термический коэффициент давления β :

$$\frac{\alpha_S}{\alpha_P} + \frac{\beta_S}{\beta_V} = 1. \quad (2)$$

В то же время из термодинамического определения параметра Грюнайзена

$$\gamma_G = V \left(\frac{\partial P}{\partial U} \right)_V = V \frac{\partial(P, V)}{\partial(U, V)} \quad (3)$$

получаем выражение

$$\gamma_G = -\frac{1}{T\alpha_S}, \quad (4)$$

отсюда, используя (2), приходим к нетривиальным выражениям для параметра Грюнайзена:

$$\frac{\beta_S}{\beta_V} = 1 + \frac{1}{T\gamma_G\alpha_P} \quad \text{и} \quad \gamma_G = -\frac{\beta_P}{T\beta_S\alpha_P}. \quad (5)$$

КАЛОРИМЕТРИЧЕСКИЕ И ОБЪЕМОМЕТРИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ДИСЛОКАЦИЙ ПРИ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ В СПЛАВЕ TiNi С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ

**Нечаев Ю.С.¹, Денисов Е.А.², Шурыгина Н.А.¹,
Синёва С.И.³, Мисоченко А.А.⁴, Столяров В.В.⁴**

¹ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», г. Москва, РФ

²Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, РФ

³Санкт-Петербургский политехнический университет, г. Санкт-Петербург, РФ

⁴Институт машиноведения им. А.А. Благонравова РАН, г. Москва, РФ

E-mail: yuri1939@inbox.ru

На основе использования подходов, методов и результатов анализа ряда открытых вопросов физического материаловедения [1-4] проведен углубленный анализ и интерпретация калориметрических и объемометрических данных [5] для прямых и обратных мартенситных превращений в наноструктурированном сплаве Ti_{49,3}Ni_{50,7} с памятью формы, полученном прокаткой с одновременным действием импульсного тока. Изучена кинетика изменения средней (т.е усредненной по всему объему образца) плотности дислокаций при охлаждении или нагреве образца с постоянной скоростью (3 К/мин) в интервале 170-370 К. Стандартные оценки, сделанные с использованием калориметрических и объемометрических данных [5], показали, что средняя плотность дислокаций при мартенситных превращениях в таких сплавах может достигать величины $\rho \sim 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, близкой к таковой в мартенситных углеродистых сталях [1]. При этом полагали, что $\rho \approx \{q/(\mu b^2)\}$ и $\rho \approx \{(\Delta V)/(Vb^2)\}$, где q – тепловой эффект превращения (Дж/см³), μ – модуль сдвига (Дж/см³), b – величина наименьшего вектора Бюргерса, $(\Delta V/V)$ – относительное изменение объема образца при превращении. Принимая во внимание данные сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии и результаты испытаний на растяжение [5], можно полагать, что дислокации локализованы в нанобластях вблизи границ зерен, при этом локальная плотность дислокаций может достигать величины $\sim 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$, близкой к таковой в нанобластях предельно неравновесных границ зерен в металлических материалах, подвергнутых интенсивному деформированию [2]. Следует подчеркнуть, что физика мартенситных превращений в деформированных Ti-Ni сплавах с памятью формы [5] отвечает явлению термоупругого равновесия при фазовых превращениях мартенситного типа - эффект Курдюмова [4].

Список литературы

- [1] Нечаев Ю.С. Распределение углерода в сталях. // УФН. 2011. Т. 181. №5. С. 483–490.
- [2] Nechaev Yu.S. On mechanisms of grain boundary sliding, in light of the Kaibyshev-Valiev data on two limit non-equilibrium GB states in deformed metallic materials // Defect and Diffusion Forum. 2018. V. 385, P. 120-125.
- [3] Нечаев Ю.С., Александрова Н.М., Шурыгина Н.А. и др. Методология и результаты изучения состояний водорода в графене, графите и сталях. // Изв. РАН, Серия физическая. 2021. Т. 85. С. 918-925.
- [4] Nechaev Yu.S., Alexandrova N.M., Shurygina N.A. et al. On manifestation & physics of the Kurdjumov and spillover effects in carbon nanostructures, under intercalation of hydrogen of high density. // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. 2020. V. 28. P. 233-237
- [5] Misochenko A.A., Kumar J.V.T., Jayaprakasam S., Padmanabhan K.A., Stolyarov V.V. Microstructure evaluation and mechanical behavior in shape memory nanostructured TiNi alloy. // Defect and Diffusion Forum. 2018. V. 385, P. 169-174.

ПОКРЫТИЯ ИЗ СИЛИЦИДОВ МОЛИБДЕНА ДЛЯ ЗАЩИТЫ СПЛАВОВ ЦИРКОНИЯ ОТ ОКИСЛЕНИЯ

**И.Б. Гнесин, Д.В. Прохоров, Н.И. Гнесина, Б.А. Гнесин, В.И. Внуков,
М.И. Карпов, И.С. Желтякова, Т.С. Строганова**

*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук
(ИФТТ РАН), 142432 Черноголовка, Россия, e-mail: ibgnedin@issp.ac.ru*

Одним из направлений исследований и разработки защитных высокотемпературных покрытий является создание устойчивого к авариям ядерного топлива [1]. В рамках этого направления существует задача создания покрытий, защищающих существующие циркониевые оболочки тепловыделяющих элементов (ТВЭЛ) от паро-циркониевой реакции, возникающей при развитии аварийных ситуаций, связанных с потерей охладителя. Силициды молибдена являются одним из перспективных материалов таких покрытий, поскольку характеризуются повышенной стойкостью к окислению в среде водяного пара [2]. Кроме того, ранее было установлено, что силициды молибдена обладают высокой диффузионной устойчивостью в паре со сплавами на основе циркония [3].

В рамках проведенных исследований изучалась возможность нанесения покрытий из сплавов системы Mo-Si на подложку из сплава на основе циркония (Э110). Покрытия наносили с помощью установки плазменного напыления УМПН-50 на открытом воздухе. В качестве наносимого порошка использовали порошок эвтектического сплава $Mo_5Si_3 + MoSi_2$ с размером основной фракции 32-63 мкм. Подложка представляла из себя прямоугольные параллелепипеды из сплава Э110 размерами 10-15 × 25 × 2 мм с закругленными ребрами. Были приготовлены образцы с различной долей защищенной покрытием поверхности: 100%, ~60% и 0%. Полученные образцы подвергались испытаниям на коррозионную стойкость на открытом воздухе. Испытания проводились в печи сопротивления, при температуре 1100 °С в течение 1 часа. В результате проведенных экспериментов было установлено, что защищенный со всех сторон силицидным покрытием образец сплава Э110 практически не изменил свою массу в процессе испытания (относительное изменение массы составило 0,2%), в то время, как масса частично защищенного и не защищенного образцов изменилась (относительное изменение массы 2.1% и 11.9%, соответственно). Полученные результаты говорят об успешном формировании плотного всестороннего покрытия, отсутствию в нем критических дефектов, а также о способности данного покрытия обеспечить защиту сплава Э110 от окисления в условиях проведенных испытаний.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Госкорпорации «Росатом» в рамках научного проекта № 20-21-00137.

Список литературы:

1. Accident Tolerant Fuel Concepts for Light Water Reactors. Vienna. IAEA-TECDOC-1797, - 2016. - 384 p.
2. Sooby Wood, E., Parker, S.S., Nelson, A.T. and Maloy, S.A., // J. Am. Ceram. Soc. - 2016. - 99. P. - 1412-1419.
3. Гнесин И.Б., Гнесин Б.А., Некрасов А.Н., Прохоров Д.В., Гнесина Н.И., Карпов М.И., Желтякова И.С. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. - 2022. № - 1. С. - 63-74.

РЕАЛИЗАЦИЯ ДАВЛЕНИЙ ~20 ГПа В ОБЛАСТИ СЕРДЦЕВИНЫ В ПРЕФОРМАХ КВАРЦЕВЫХ ВОЛОКОННЫХ СВЕТОВОДОВ В ПРОЦЕССЕ ИЗГОТОВЛЕНИЯ

Г. Буфетова¹, А. Косолапов¹, М. Яшков², А. Умников², В. Вельмискин¹,
В. Цветков¹, И. Буфетов¹

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия, iabuf@fo.gpi.ru

²Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН, Н.Новгород,
Россия, yashkovmv@yandex.ru

Состояние поверхности раздела между сердцевиной и оболочкой в волоконных световодах в значительной степени определяет их световедущие свойства. При изготовлении ряда заготовок световодов наблюдаются значительные нарушения геометрии поверхности раздела [1, 2], что ведет к увеличению оптических потерь в световодах.

Нами впервые выполнены измерения показателя преломления сердцевины заготовок волоконных световодов на основе кварцевого стекла при температуре порядка 2000°C непосредственно в процессе их изготовления на MCVD станке (метод измерений предложен в [3]). Из полученных результатов следует, что показатель преломления легированного стекла сердцевины в таких условиях может повышаться до величины более ~1.75 (при показателе преломления сердцевины после остывания до комнатной температуры около 1.46), что свидетельствует о реализации в области сердцевины заготовки давлений, близких или превышающих теоретическую прочность кварцевого стекла (~20 ГПа). Данный факт может служить объяснением известного явления образования системы так называемых "звездочек" в области сердцевины заготовок волоконных световодов некоторых составов (см. Рис.1) как систем радиальных трещин, формирующихся в результате разрушения прилегающих к сердцевине слоев кварцевой оболочки под действием высокого давления.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-12-00361.

Литература

1. Biryukov, A.S. et al. Proceedings of SPIE 3211, 309 (1997).
2. McNamara et al. Optics communications **230**, 45 (2004).
3. Bufetova, G.A. et al. Journal of Crystal Growth, **575**, 126355(2021).

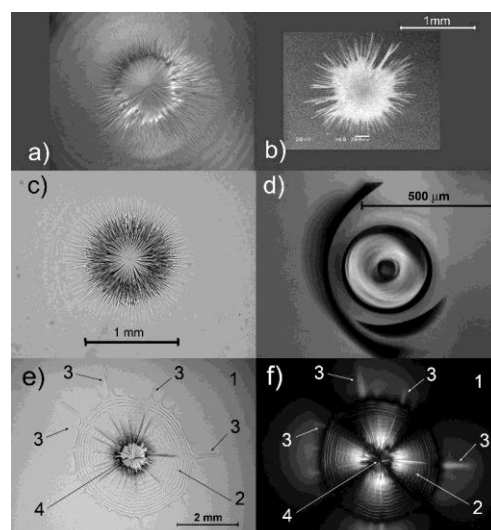


Рис.1. Поперечные сечения заготовок световодов. а) Алюмосиликатная заготовка. б) Изображение той же заготовки в электронном микроскопе. в) Германо-силикатная заготовка. д) Фосфоросиликатная заготовка с кольцевыми трещинами. е) Al+Ge заготовка. ф) Образец е) в скрещенных поляризаторах. На а), б), с), е) и ф) наблюдаются радиальные трещины. Масштаб одинаков для а) и б), а также для е) и ф). 1-опорная труба, 2-внутренняя оболочка, 3-некоторые из трещин, продолжающиеся в опорной трубе, 4-сердцевина заготовки.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ И АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ СЛОИСТОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА CrBr₃

Божко С.И.¹, Ионов А.М.¹, Калашникова А.С.^{1,2}, Касимов С.Д.^{1,2}

¹ИФТТ, Черноголовка, Россия

²МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

Хромид брома CrBr₃ - слоистый ферромагнетик с температурой Кюри 37К, обладает ромбоэдрической структурой R3 (a = 0,6308 нм, c = 1,835 нм), в котором плоские атомные слои CrBr₃ связаны между собой силами Ван-дер-Ваальса. Проводились исследования электронной и атомной кристаллической структуры поверхности скола *in situ*, *ex situ*. Было обнаружено взаимодействие чистой поверхности CrBr₃ (100) с окружающей атмосферой при выдержке на воздухе с образованием, по-видимому, гидроксила на поверхности.

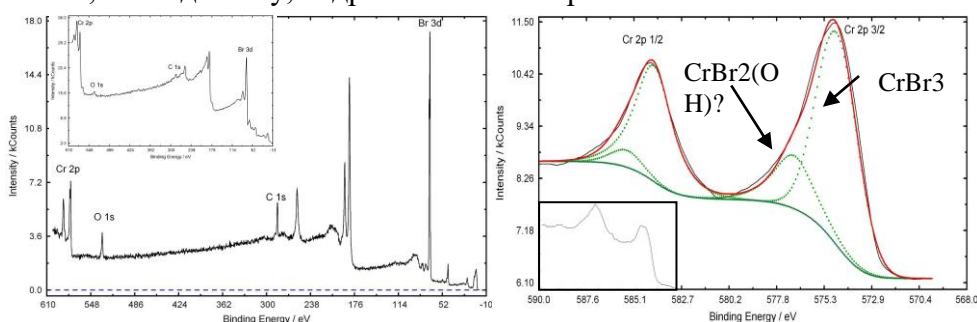


Рис. 1. РФЭС спектры CrBr₃ (100) до и после травления (слева), справа - дублеты Cr 2p

На спектрах видно, что у каждого из этих пиков в дублете хрома (Cr 2p 3/2 576,9 эВ) есть небольшое плечо слева, аналогично [1], соответствующий состоянию Cr, отвечающему формированию гидроксидной формы (579,9 эВ), ионное травление убирает эту особенность с поверхности (100).

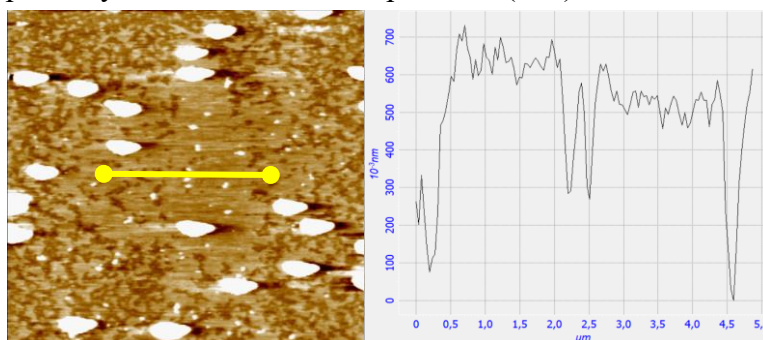


Рис. 2. АСМ изображение поверхности (100) CrBr₃ после экспозиции на воздухе в течение 1-го часа, справа - профиль сечения поверхности

Эксперименты АСМ показали, что на поверхности образца в течение 1 часа формируется тонкая пленка с характерной толщиной порядка размера элементарной ячейки (~4А) с образованием островков, предположительно, гидроксидной фазы CrBr₃.

Литература

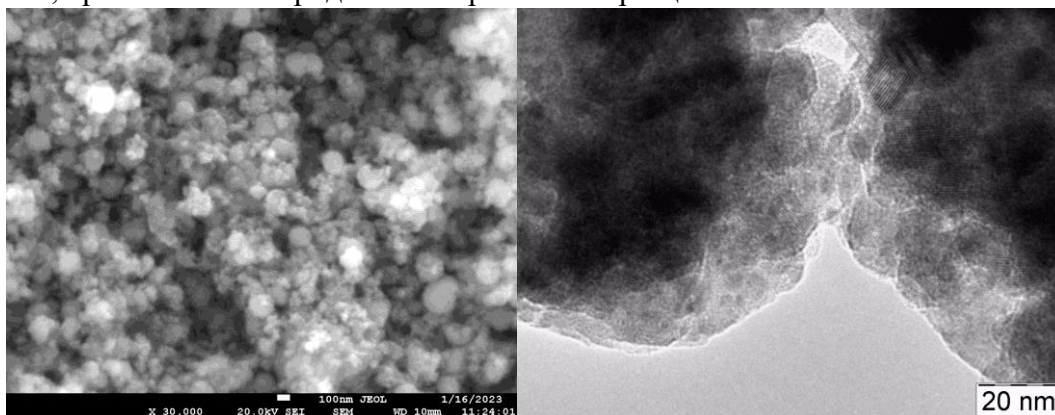
1. Yanfei Wu, et al, Materials 2022, 15, 3007. <https://doi.org/10.3390/ma15093007>

СИНТЕЗ И СТРУКТУРА ЧАСТИЦ ТИПА ЯДРО-ОБОЛОЧКА НА ОСНОВЕ ПОЛИСУРЬМЯНОЙ КИСЛОТЫ

Рубцова Е. Д., Ярошенко Ф.А., Филоненко Е.М., Лупицкая Ю.А.
 ФГБОУ ВО, 454001, Челябинск, Челябинская обл., ул. Братьев Кашириных, д.129
 e-mail: fyaroshenko@yandex.ru

Модификация протонпроводящих мембран гетерополикидотами приводит к улучшению их характеристик, однако при работе мембранно-электронного блока (МЭБ) допант вымывается и характеристики МЭБ падают. Создание и введение в мембраны гидратированных частиц типа ядро-оболочка позволит снизить вымываемость допанта. В качестве компонентов для создания структуры типа ядро-оболочка предложены полисурьмяная кислота (ПСК) и SiO_2 . Синтез частиц типа ядро-оболочка на основе ПСК и SiO_2 проводили путем приливания равных объемов суспензии ПСК и 5% раствора силиката натрия. Суспензию ПСК получали по известной методике, путем гидролиза в избытке воды предварительно окисленной азотной кислотой треххлористой сурьмы. Фазовый анализ проводили с помощью рентгеновского порошкового дифрактометра Bruker D8 Advance в интервале 2θ от 10 до 80. Электронно-микроскопические изображения были получены на сканирующем электронном микроскопе Jeol JSM-7001F. Исследование внутренней структуры полученных образцов проводили с помощью просвечивающего электронного микроскопа высокого разрешения Jeol JEM-2100.

Показано, что образец состоит из сферических частиц, размер которых варьируется в интервале от 20 до 200 нм с четкой контрастной границей между частицами (рис.). Энергодисперсионный анализ показал равномерное распределение ионов сурьмы, кремния и кислорода по поверхности образца.



РЭМ- и ПЭМ-снимки частиц типа «ядро-оболочка» на основе ПСК и SiO_2

На ПЭМ-снимках виден фазовый контраст (рис.), области темного контраста представляют собой частицы ПСК, размером 60 – 80 нм, состоящие из нескольких сросшихся монокристаллов, об этом свидетельствует наличие линий (атомных плоскостей) параллельных друг другу. В областях светлого контраста отсутствуют линии атомных плоскостей, что указывает на присутствие аморфной фазы поликремниевой кислоты на поверхности частиц ПСК, так называемой оболочки, толщина которой до 20 нм.

Таким образом, показано, что были получены частицы типа ядро-оболочка, где ядром являются поликристаллические частицы ПСК, а оболочкой слой аморфного диоксида кремния.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 23-23-00140

РОСТ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ 4,7-БИС(2,5- ДИМЕТИЛФИНИЛ)БЕНЗОТИАДИЗОЛА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ

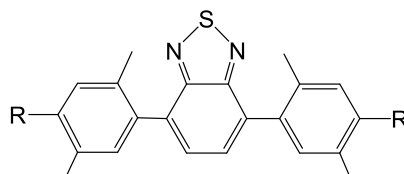
Сорокин Т.А.^{1,2}, Постников В.А.^{1,2}, Кулишов А.А.^{1,2}, Лясникова М.С.¹, Сорокина Н.И.¹, Скоротецкий М.С.², Борщев О. В.², Свидченко Е. А.², Сурин Н. М.²

¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва

²Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН,
Москва, tim29@inbox.ru

Линейные сопряженные молекулы, состоящие из групп фенилена и бензотиадиазола являются эффективными люминофорами с большим стоксовым сдвигом и коротким временем высвечивания [1,2].

Настоящая работа посвящена исследованиям фазового поведения, растворимости, роста, структуры и флуоресцентных свойств кристаллов 4,7-бис(2,5 диметилфенил)бензотиадиазола и его производных с концевыми триметилсилильными и алкильными заместителями (рис. 1).



R = -H; -Si(CH₃)₃; -n-гексил; -n-децил

Рис. 1 Общая химическая структурная формула исследуемых соединений.

Синтез, очистка, наработка и охарактеризация соединений выполнены в лаборатории функциональных материалов для органической электроники и фотоники ИСПМ РАН. Методом ДСК и ТГА определены параметры фазовых переходов и установлена высокая термостабильность исследуемых соединений. Монокристаллы исследуемых соединений были получены из растворов в условиях медленного изотермического испарения растворителя. Структура монокристаллических образцов исследована при температурах 293 и 85 К на рентгеновском дифрактометре XtaLAB Synergy-DW, HyPix-Arc 150' (Rigaku Oxford Diffraction). Исследованы спектры поглощения и флуоресценции, квантовый выход и кинетики флуоресценции молекулярных растворов и кристаллов.

Список использованных источников:

1. Skorotetcky M.S., Krivtsova E.D., Borshchev O. V., Surin N.M., Svidchenko E.A., Fedorov Y. V., Pisarev S.A., Ponomarenko S.A. Influence of the structure of electron-donating aromatic units in organosilicon luminophores based on 2,1,3-benzothiadiazole electron-withdrawing core on their absorption-luminescent properties // *Dyes and Pigments*.- 2018. -V. 155 - P. 284–291.

2. Постников В. А., Сорокин Т.А., Кулишов А. А., Лясникова М. С., Сорокина Н.И., Юрасик Г.А., Борщев О. В., Скоротецкий М. С., Свидченко Е.А., Сурин Н.М. Новые люминесцентные материалы на основе дифенил-бензотиадиазола и его производных // *Успехи в химии и химической технологии*. 2022. Т. 36, № 7. С. 129–131.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-13-00255 с использованием оборудования ЦКП ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН.

РОСТ, СТРУКТУРА И СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ БИТИОФЕН-БЕНЗОТИАДИАЗОЛА И ЕГО ПРОИЗВОДНОГО С КОНЦЕВЫМИ ТРИМЕТИЛСИЛИЛЬНЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ

Сорокин Т.А.¹, Постников В.А.¹, Кулишов А.А.¹, Лясникова М.С.¹, Сорокина Н.И.¹, Скоротецкий М.С.², Борщев О. В.²

¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва

²Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва, tim29@inbox.ru

Соединение на основе сопряженных групп тиофена и бензотиадиазола, 4,7-ди(тиофен-2-ил)бензотиадиазол (T_2 -BTD) (рис. 1а), является органическим полупроводником с хорошими фотофизическими свойствами [1,2]. Согласно [1], кристаллы T_2 -BTD относятся к ромбической сингонии с пр. гр. Pbcа. Тем не менее, к настоящему времени рост кристаллов данного соединения остается малоизученным. Обладая хорошей растворимостью, T_2 -BTD является интересным объектом для исследования процессов кристаллизации с целью получения крупных монокристаллов для задач оптоэлектроники и фотоники. В данной работе представлены результаты исследования роста, структуры и термодинамических (растворимость, параметры плавления и термостабильность) и спектрально-флуоресцентных свойств кристаллов T_2 -BTD и его производного 4,7-бис(5-(триметилсилил)тиофен-2-ил)бензотиадиазола (рис. 1б), выращенных из растворов (рис. 1в,г). Исследованы спектрально-флуоресцентные свойства растворов и кристаллов T_2 -BTD и $(TMS-T)_2$ -BTD.

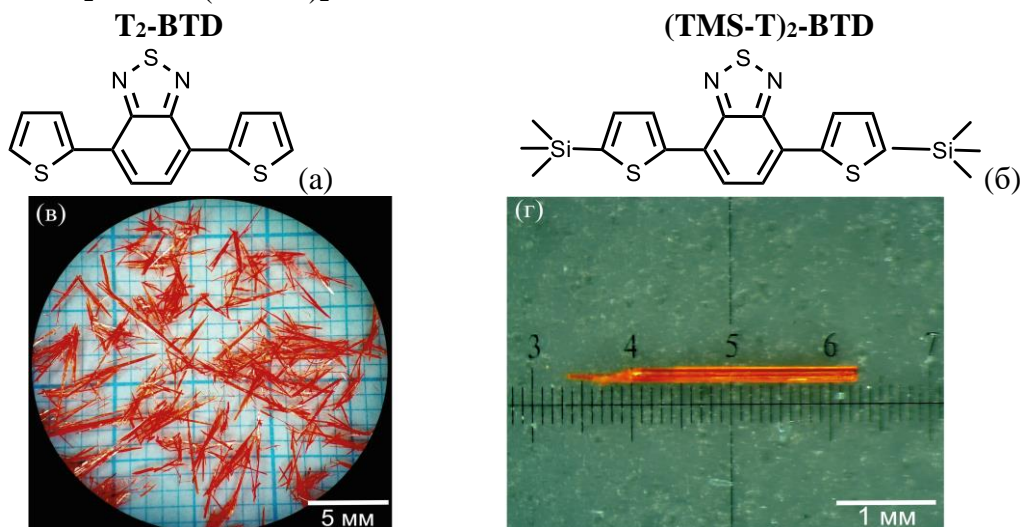


Рис. 1. Структурные химические формулы T_2 -BTD (а) и $(TMS-T)_2$ -BTD (б); кристаллы T_2 -BTD (в) и $(TMS-T)_2$ -BTD (г).

Список цитируемых источников:

1. Pati P.V. et. al. Solution processable benzooxadiazole and benzothiadiazole based D-A-D molecules with chalcogenophene: Field effect transistor study and structure property relationship // ACS Appl. Mater. Interfaces. – 2013. – V. 5, No. 23. – P. 12460–12468.
2. Iagatti A. et. al. Photophysical properties and excited state dynamics of 4,7-dithien-2-yl-2,1,3-benzothiadiazole // Phys. Chem. Chem. Phys. Royal Society of Chemistry, – 2017. – V. 19, No. 21. – P. 13604–13613.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 22-13-00255 с использованием оборудования ЦКП ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН.

МНОГОМАСШТАБНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ МАТЕРИАЛОВ НА ПРИМЕРЕ ПОЛИЛАКТИДОВ.

Асадчиков В.Е., Бузмаков А.В., Волков В.В., Дьячкова И.Г., Золотов Д.А., Кривонос Ю.С., Кротова Л.И., Трифанова Е.М., Дунаев А.Г., Попов В.К.
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Ленинский просп., 59

Пористые материалы широко используются в различных направлениях, начиная с процессов фильтрации и заканчивая микроэлектроникой. Одно из таких направлений - использование биорезорбируемых пористых матриц для регенерации живых тканей (тканевая инженерия). Для всех применений пористых сред необходимы данные как о размерах пор, так и об их связности. Широкое распределение пор по размерам затрудняет характеризацию пористой структуры с помощью какого-либо одного физического метода. В связи с этим в настоящей работе для выявления пористой структуры в масштабе линейных размеров от 0,02 мкм до 1000 мкм был применен набор методов, включая малоугловое рентгеновское рассеяние, гелиевую пикнометрию, ртутную интрузионную порозиметрию, а также лабораторную и синхротронную рентгеновской микротомографию. В качестве основного объекта исследований использовались пористые матрицы полилактидов. Они были созданы на основе, получаемых при обработке аморфных и частично-кристаллические полимеров с помощью сверхкритического диоксида углерода (ск-СО₂). Важно, что получение матриц по этой технологии проходит без применения токсичных органических растворителей или высоких температур.

Полученные разными методами результаты находятся в хорошем соответствии. Предложенный подход исследования пористой структуры открывает возможности для широкомасштабной оценки, компьютерного моделирования и прогнозирования физико-механических свойств полилактидных скаффолдов, а также их поведения при биодеградации в организме [1], но может быть применён и для анализа иных пористых сред.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части проведения томографических измерений и интерпретации результатов, Российского фонда фундаментальных исследований РФФИ (гранты 19-29-12045 и 18-29-26028) в части томографической реконструкции.

[1] *I. Buzmakov A.V., Dunaev A.G., Krivonosov Y.S., Zolotov D.A., Dyachkova I.G., Krotova L.I., Volkov V.V., Bodey A.J., Asadchikov V.E., Popov V.K. Wide-Ranging Multitool Study of Structure and Porosity of PLGA Scaffolds for Tissue Engineering // Polymers, 2021, Vol. 13, No. 7, P. 1021.*

ПРАКТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ КОРРЕКЦИИ АРТЕФАКТОВ, ВЫЗВАННЫХ НЕСОГЛАСОВАННОСТЬЮ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ РЕНТГЕНОВСКОГО МИКРОТОМОГРАФА

Бузмаков А. В.¹, Григорьев А.Ю.¹, Кривонос Ю.С.¹, Золотов Д. А.¹,
Дьячкова И. Г.², Русаков А.А.¹, Чукалина М.В.¹, Асадчиков В. Е.¹

¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия,
buzmakov@gmail.com

Рентгеновская микротомография позволяет исследовать внутреннюю структуру объектов с высоким разрешением. Основными узлами микротомографа являются рентгеновский источник, гониометр для позиционирования образца и детектор рентгеновского излучения. Взаимное пространственное расположение этих узлов формирует набор геометрических параметров, описывающих томографическую схему. С учётом геометрии измерения выбирается (или разрабатывается) метод томографической реконструкции. В реальных экспериментах геометрические параметры невозможно определить точно и, более того, под действием внешних факторов они могут меняться во время сканирования. Неточности определения геометрических параметров при проведении измерений приводят к ошибкам томографической реконструкции.

В данной работе представлены возможности разработанных и применённых математических методов компенсации неточности определения (или неучёта дрейфа) геометрических параметров томографических измерений на примере лабораторного микротомографа «ТОМАС», созданного во ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

Предложен метод, позволяющий компенсировать наклон оси вращения исследуемого объекта. Данный метод основан на минимизации различий между экспериментальными проекциями и репроекцией томографической реконструкции и позволяет в автоматическом режиме находить положение оси вращения объекта и её наклон с субпиксельной точностью. Кроме того, введённая нами метрика даёт возможность детектировать случаи, когда сам объект изменяет форму и/или положение во время проведения измерений.

Наконец, нами разработан и предложен метод мониторинга изменения формы зондирующего рентгеновского пучка. Этот метод разработан с использованием нейронных сетей и позволяет в некоторых случаях компенсировать дрейф формы рентгеновского пучка, приводящий к появлению кольцевых артефактов на изображениях.

В докладе будут представлены описания и результаты работы предложенных автоматических алгоритмов коррекции томографических данных.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части проведения рентгеновских томографических исследований.

НЕПОВТОРИМЫЙ ГРАФЕН

Шевчун А.Ф., Прокудина М.Г., Тихонов Е.С.

*Институт Физики Твёрдого Тела РАН,
г. Черноголовка, Россия, shevchun@mail.ru*

На приведенном ниже рисунке представлены результаты измерения магнитосопротивления на **лучшем** изготовленном нами образце. В данном случае была применена технология по сборке полустека: на тонкий слой hBN перенесен графен, контакты к которому сделаны с помощью оптической литографии и термического напыления хрома и золота.

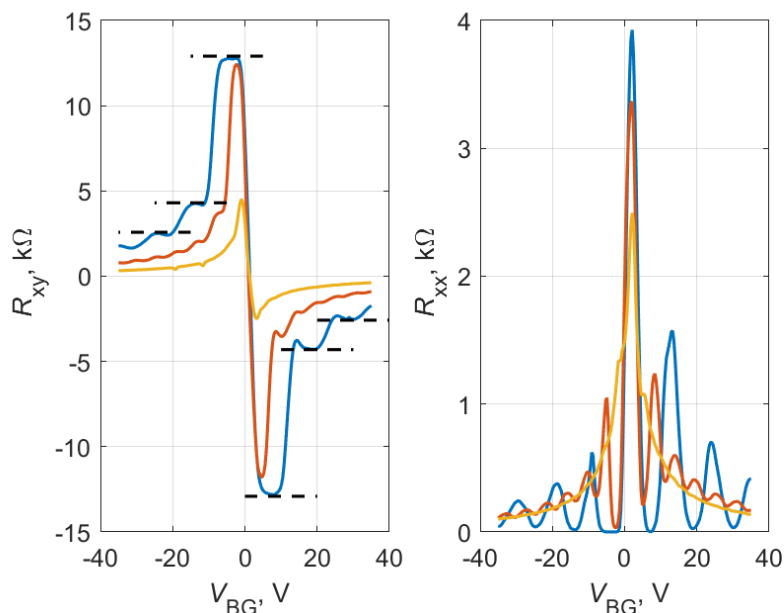
Подвижность носителей в этом образце при гелиевых температурах оценивается нами в $15000 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$.

Всего было изготовлено около 50 графеновых образцов с применением различных технологий. Так, мы получили следующие объекты:

- графен на поверхности SiO_2 с различными технологиями напыления контактов;
- графен, перенесенный на заранее изготовленные контакты на поверхности SiO_2 ;
- полустеки: графен, перенесенный на тонкий слой hBN;
- стеки: графен, перенесенный на тонкий слой hBN, накрытый сверху слоем hBN.

Все эти образцы имеют заметно худшие транспортные характеристики по сравнению с **лучшим** образцом.

Мы хотели бы подробно рассказать о своем опыте в сборке графеновых гетероструктур, а также обсудить возникающие при этой процедуре проблемы и пути их решения.



Работа профинансирована в рамках выполнения гранта РФФ 18-72-10135.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕХОДА МАТЕРИАЛА КУМУЛЯТИВНОЙ ОБЛИЦОВКИ В СТРУЮ. СЛУЧАЙ МЕДИ

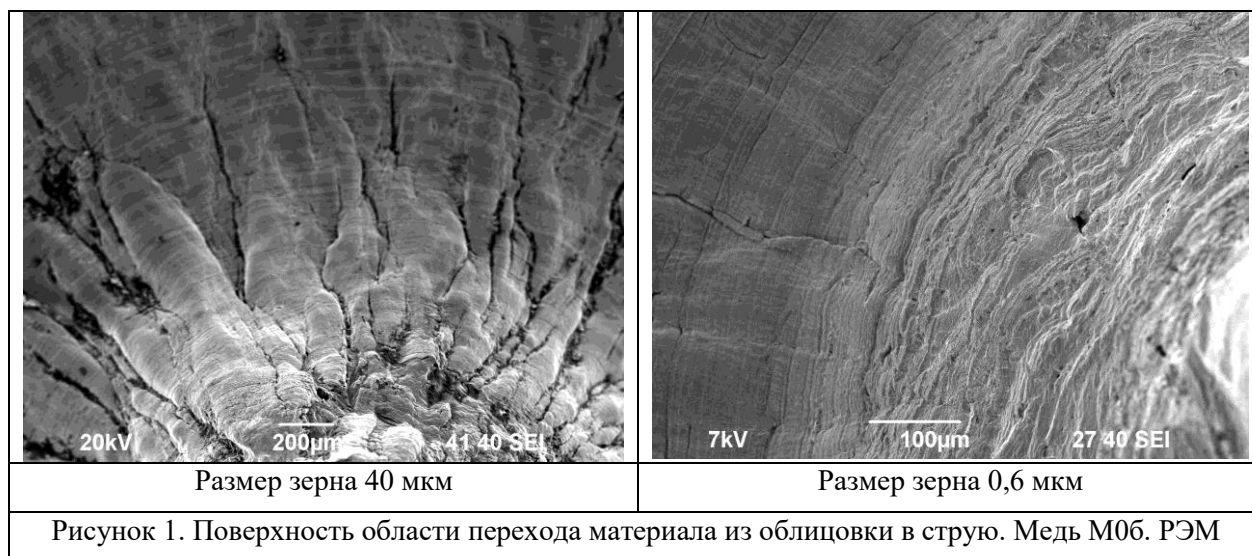
Н.В. Мелёхин

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Н.Новгород, РФ, melehin@nifti.unn.ru*

В классической гидродинамической теории кумуляции, материал облицовки и струи рассматривается как жидкость. Однако, более поздние экспериментальные исследования показали, что материал струи и облицовки при обжати находятся в кристаллическом состоянии. При этом, вопрос трансформации поверхности материала облицовки и струи в процессе деформирования остается неизученным из-за сложности проведения эксперимента в условиях высоких скоростей течения, скоростей деформации и давлений.

Разработанная в НИФТИ экспериментальная методика изучения течения материала в условиях кумуляции позволяет изучать в лабораторных условиях как течение материала при высокоскоростном обжати, так и эволюцию структуры и поверхности при переходе из микро-облицовки в струю.

В работе проведены экспериментальные исследования процесса эволюции поверхности меди при переходе из облицовки в струю. Показано, что исходная структура материала образцов до деформации оказывает влияние на характерный рельеф поверхности. Исследование проводилось на образцах меди М0б с крупнозернистой и мелкозернистой структурой. Полученные с помощью растровой электронной микроскопии снимки поверхности материала в области перехода приведены на рисунке 1. Испытания проводились в одинаковых условиях.



Литература

1. V.F. Nesterenko et al. Shear localization and recrystallization in high-strain, high-strain-rate deformation of tantalum// Materials Science and Engineering A229 (1997) 23-41.
2. U. Andrade et al. Dynamic recrystallization in high-strain, high-strain-rate plastic deformation of copper // Acta metal. mater. Vol. 42, No. 9, pp. 3183-3195, 1994.
3. FAN Ai-ling et al. Comparison of microstructures in electroformed and spin-formed copper liners of shaped charge undergone high-strain-rate deformation // Trans. Nonferrous Met. Soc. China 17(2007) 1447-1450.
4. Физика взрыва / С. Г. Андреев и др.; под ред. Л. П. Орленко. Т.2 - Изд. 3-е, испр. - Москва : Физматлит, 2004.

РАБОЧИЕ КОНСТРУКЦИИ СВЕРХПРОВОДЯЩЕГО СПИНОВОГО КЛАПАНА

Камашев А. А.¹, Гарифьянов Н. Н.¹, Валидов А. А.¹, Фоминов Я. В.^{2,3}, Гарифуллин И. А.¹

¹ Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, г. Казань, Россия, kamandi@mail.ru

² Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, г. Черноголовка, Россия

³ Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», г. Москва, Россия

В данной работе были приготовлены две рабочие серии моделей сверхпроводящего спинового клапана: серия А — $\text{HA}^{\text{hot}}(20\text{nm})/\text{Al}(4\text{nm})/\text{HA}^{\text{RT}}(d_{\text{HA}^{\text{RT}}})/\text{Al}(1.2\text{nm})/\text{Pb}(60\text{nm})$ с варьируемой толщиной HA^{RT} -слоя от 1 до 5 нм; серия В со слоями изолятора в интерфейсах $\Phi 1/\text{С}$ и $\text{С}/\Phi 2$ — $\text{CoO}_x(3.5\text{nm})/\text{Co}(3\text{nm})/\text{Pb}(d_{\text{Pb}})/\text{Co}(3\text{nm})$ с варьируемой толщиной Pb -слоя от 60 до 120 нм. Для серии А мы исследовали зависимость T_c от угла α между направлением замороженного поля и внешним магнитным полем, приложенных вдоль плоскости образца. Максимальная разница в T_c между параллельной и перпендикулярной ориентациями намагниченностей $\Phi 1$ - и $\Phi 2$ -слоев составила $\Delta T_c^{\text{trip}} \sim 1.1$ К для образца $\text{HA}^{\text{hot}}(20\text{nm})/\text{Al}(4\text{nm})/\text{HA}^{\text{RT}}(d_{\text{HA}^{\text{RT}}})/\text{Al}(1.2\text{nm})/\text{Pb}(60\text{nm})$ (см. Рис. 1а).

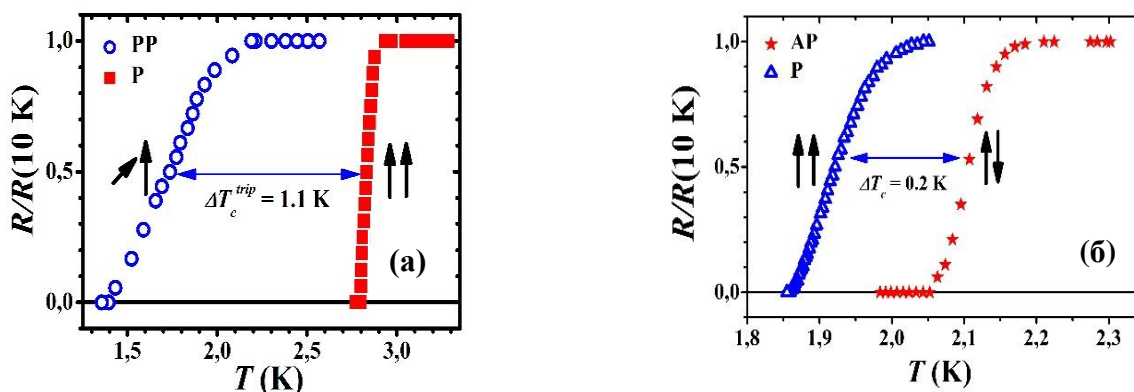


Рисунок 1: (а) Кривые сверхпроводящих переходов, измеренные при параллельной и перпендикулярной ориентации намагниченностей ферромагнитных слоев, во внешнем магнитном поле $H_0 = 4$ кЭ для образца $\text{HA}^{\text{hot}}(20\text{nm})/\text{Al}(4\text{nm})/\text{HA}^{\text{RT}}(5\text{nm})/\text{Al}(1.2\text{nm})/\text{Pb}(60\text{nm})$; (б) Кривые сверхпроводящих переходов, измеренные при параллельной и антипараллельной ориентации намагниченностей Φ -слоев для образца $\text{CoO}_x(3.5\text{nm})/\text{Co}(3\text{nm})/\text{Pb}(60\text{nm})/\text{Co}(3\text{nm})$ со слоями изолятора в интерфейсах Co/Pb и Pb/Co . Для изменения взаимной ориентации намагниченностей Φ -слоев прикладывалось внешнее магнитное поле $H_0 = 1$ кЭ.

Для серии В мы исследовали кривые сверхпроводящих переходов при параллельной (Р) и антипараллельной (АР) ориентации намагниченностей Φ -слоев. Для всей этой серии наблюдалась разница в кривых сверхпроводящих переходов при Р- и АР- ориентации намагниченностей Φ -слоев. Наиболее интересный результат был получен для образца $\text{CoO}_x(3.5\text{nm})/\text{Co}(3\text{nm})/\text{Pb}(60\text{nm})/\text{Co}(3\text{nm})$ (см. Рис. 1б). Величина эффекта ССК составила $\Delta T_c \sim 0.2$ К. При этом удалось продемонстрировать полный эффект ССК, так как $\Delta T_c > \partial T_c$ (где ∂T_c - ширина сверхпроводящего перехода). Стоит подчеркнуть, что для аналогичной серии образцов, но без слоев изоляторов зафиксировать T_c не удалось.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТОНКОПЛЕНОЧНОЙ МУЛЬТИСЛОЙНОЙ СТРУКТУРЫ CO/AL/FE/PB НА ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПОДЛОЖКЕ PMN-PT

Камашев А. А.¹, Гарифьянов Н. Н.¹, Валидов А. А.¹, Большаков С.А.¹, Мамин Р. Ф.¹, Гарифуллин И. А.¹

¹ Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ Казанский научный центр РАН, г. Казань, Россия, kamandi@mail.ru

Были проведены измерения транспортных свойств серии образцов Co(3нм)/Al(4нм)/Fe(d_{Fe})/Pb(60нм)/Si₃N₄(85нм) с варьируемой толщиной Fe-слоя от 0.9 до 3 нм, приготовленной на пьезоэлектрической подложке PMN-PT. Максимальное влияние электрического поля на пьезоэлектрическую подложку PMN-PT возникает, когда электрическое поле приложено перпендикулярно плоскости образца. В связи с этим, подводящие электроды для создания электрического поля располагались на нижней и верхней грани образца.

Результаты по сдвигу T_c при прикладывании электрического поля к пьезоэлектрической подложке представлены на Рис. 1. Данный сдвиг увеличивался с увеличением величины электрического поля. На Рис. 1а величина электрического поля составляет 0.6 кВ/см, при этом сдвиг T_c составляет 6 мК. На Рис. 1б величина электрического поля составляет 1 кВ/см, при этом сдвиг T_c составляет 10 мК, что по величине примерно равно половине ширины сверхпроводящего перехода.

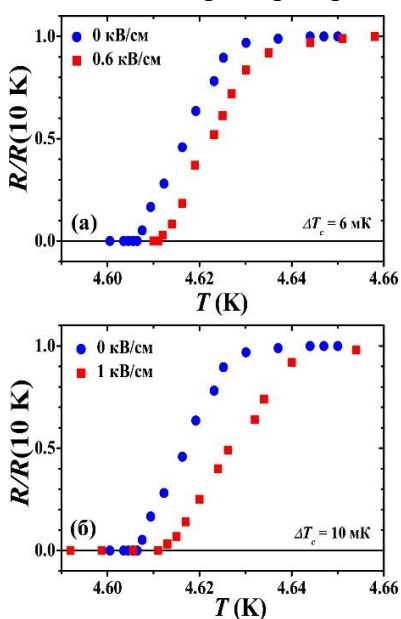
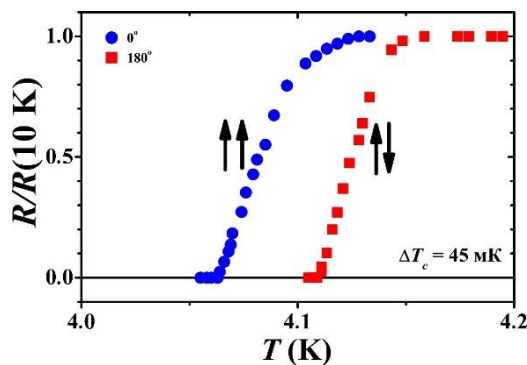


Рисунок 1: Кривые сверхпроводящих переходов для образца Co(3нм)/Al(4нм)/Fe(1нм)/Pb(60нм)/Si₃N₄(85нм) при прикладывании электрического поля к пьезоэлектрической подложке PMN-PT: (а) – электрическое поле 0.6 кВ/см, сдвиг T_c составляет 6 мК; (б) – электрическое поле 1 кВ/см, сдвиг T_c составляет 10 мК.

Измерения в магнитном поле 100 Э представлены на Рис. 2. Согласно Рис. 2, величина эффекта сверхпроводящего спинового клапана составила $\Delta T_c = 45$ мК при ширине сверхпроводящего перехода $\delta T_c \sim 20$ мК. Таким образом, был зарегистрирован полный эффект сверхпроводящего спинового клапана.

Рисунок 2. Кривые сверхпроводящих переходов для образца Co(3нм)/Al(4нм)/Fe(1нм)/Pb(60нм)/Si₃N₄(85нм) при параллельной (0°) и антипараллельной (180°) ориентации намагниченностей Ф-слоев в магнитном поле 100 Э. Величина эффекта ССК составляет 45 мК при $\delta T_c \sim 20$ мК. Продемонстрирован полный эффект ССК.



Исследования проведены за счет средств гранта РНФ № 21-72-10178.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРЕЗАНИЯ ЛИСТА ГРАФЕНА ЗОНДОМ-КАТАЛИЗАТОРОМ ПОД ЭЛЕКТРОННЫМ ОБЛУЧЕНИЕМ

А.С. Сеница^{1,2}, Ю.Г. Полинская², А.А. Книжник^{1,2}, А.М. Попов³

¹ НИЦ Курчатовский Институт, Москва, Россия, alexsinitza91@gmail.com,

² ООО "Лаборатория Кинтех", Москва, Россия,

³ Институт спектроскопии РАН, Троицк, Россия

На примере листа графена и никелевого катализатора предложен и исследован с помощью атомистического моделирования метод прецизионной резки двумерных материалов. Разрезание производится одновременным действием катализатора на кончике зонда сканирующего микроскопа и электронного пучка в просвечивающем электронном микроскопе высокого разрешения (HRTEM). Моделирование методом реакционной молекулярной динамики в рамках подхода CompuTEM [1] для описания эффектов облучения электронами показывает, что именно комбинация никелевого катализатора и электронного облучения имеет решающее значение для резки графена и позволяет получить разрезы с прямыми краями шириной около 1–1,5 нм. Детальный атомистический механизм разрезания графена исследуется путем анализа статистики реакций удаления атомов и перестройки химических связей в системе, вызванных облучением. Показано, что основными каналами удаления атомов, приводящими к формированию и удлинению разреза, являются (1) удаление двухкоординированных атомов углерода на краях разреза, связанных с иглой никеля, и (2) удаление трехкоординированных атомов из дефектной структуры графена вблизи иглы зонда. В то же время удаление двухкоординированных атомов, не связанных с зондом, и атомов в углеродных цепочках на краях разреза способствует сглаживанию его краев. Обсуждается существенное отличие от ранее установленного атомистического механизма разрезания углеродной нанотрубки [2], также при одновременном воздействии электронного облучения и никелевого катализатора. Установленный в работе атомистический механизм разрезания графена подтверждается ab initio расчетами энергетики основных реакций, связанных с удалением атомов углерода из системы. ¶

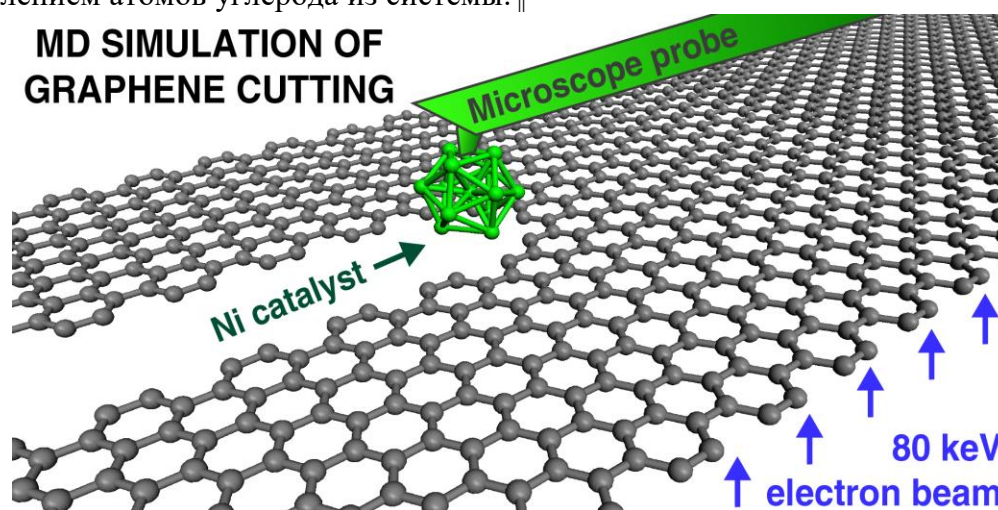


Рисунок 1. Схема, иллюстрирующая разрезание листа графена при одновременном воздействии никелевого катализатора на кончике зонда микроскопа и электронного облучения.

Литература

1. Skowron S. T. et al. //Nanoscale. – 2013. – Т. 5. – №. 15. – С. 6677-6692.
2. Lebedeva I. V. et al. //Nanoscale. – 2014. – Т. 6. – №. 24. – С. 14877-14890.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ НОВЫХ НАНООБЪЕКТОВ ПРИ ТРАНСФОРМАЦИИ ПОЛИАРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ МОЛЕКУЛ

Н.А. Мацокин¹, А.С. Сеница^{2,3}, Ю.Г. Полынская³, А.А. Книжник^{2,3}, А.М. Попов⁴

¹МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия,

²НИЦ Курчатовский Институт, Москва, Россия, alexsinitsa91@gmail.com,

³ООО "Лаборатория Кинтех", Москва, Россия,

⁴Институт спектроскопии РАН, Троицк, Россия

Материалам на основе углеродных наноструктур характерны уникальные химические, механические и электронные свойства, а также широкий спектр возможных геометрий структуры [1]. Например, недавно синтезированный тип полиароматических углеводородных молекул-старфенов ([16]starphene) [2] со структурой из 3х и более аценовых лопастей, соединенных одним бензольным кольцом. Молекулы-старфены могут представлять интерес для приложений в органической электронике, в качестве компонентов органических полевых транзисторов (OFET) или органических светоизлучающих диодов (OLED).

В продолжение предыдущих исследований образования одномерных нанобъектов под действием электронного облучения [3] проведено молекулярно-динамическое моделирование трансформации недавно синтезированной молекулы [16]старфена [2] в стабильную безводородную углеродную полициклическую молекулу под действием электронного облучения в переходном электронном микроскопе высокого разрешения (HRTEM). Ранее разработанный алгоритм CompuTEM [4] был использован для моделирования электронного облучения с энергией электронов 45 и 80 кэВ. Трансформация была изучена как для молекулы в вакууме, так и для молекулы на графеновой подложке. Установлено, что трансформация происходит при всех рассмотренных энергиях электронов и происходит в две стадии: (1) десорбция водорода под действием электронного облучения и (2) спонтанная трансформация антраценоподобных гексагональных рядов в цепочки. Установлено, что наличие подложки стабилизирует трансформацию и значительно сокращает её время. Установленный атомистический механизм трансформации был подтвержден проведенными расчетами DFT.¶

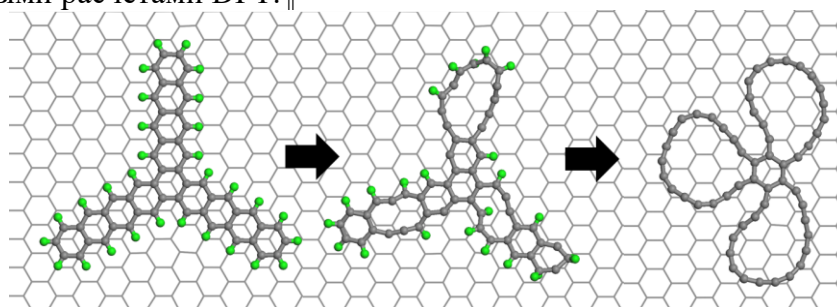


Рисунок 1. Моделирование трансформации структуры молекулы [16]старфена на графеновой подложке при облучении электронами с энергией 45 кэВ.

Литература

1. Jin C. et al. //Physical review letters. – 2009. – Т. 102. – №. 20. – С. 205501.
2. Holec J. et al. //Angewandte Chemie. – 2021. – Т. 60. – №. 14. – С. 7983-7983.
3. Sinitsa A. S. et al. //Physical Chemistry Chemical Physics. – 2021. – Т. 23. – №. 1. – С. 425-441.
4. Skowron S. T. et al. //Nanoscale. – 2013. – Т. 5. – №. 15. – С. 6677-6692.

СТРУКТУРА И МАРТЕНСИТНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВАХ Ti-Hf-Zr-Ni-Cu-Co

Беляев С.П.¹, Реснина Н.Н.¹, Поникарова И.В.¹, Сибирев А.В.¹, Ребров Т.В.¹, Стародубова М.С.¹, Кальницкая М.В.¹, Березовская С.В.¹, Иванов А.М.¹, Бикбаев Р.М.¹, Базлов А.И.^{1,2}, Андреев А.В.³

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: resnat@mail.ru

²Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС", Россия, Москва

³Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Россия, Москва

Высокоэнтропийные сплавы с эффектом памяти формы являются новыми перспективными объектами, сочетающими в себе уникальные свойства высокоэнтропийных сплавов и функциональные свойства сплавов с памятью формы. Условно высокоэнтропийные сплавы с эффектом памяти формы можно разделить на сплавы, созданные на основе бинарного сплава TiNi, и на базе других сплавов. В первом случае в бинарный сплав добавляют элементы эквивалентные титану, такие как гафний и цирконий, и элементы, эквивалентные никелю, такие как медь, кобальт, железо, палладий. Сплавы с эффектом памяти формы на основе TiNi являются прецизионными, поскольку изменение концентрации даже одного элемента приводит к существенному изменению как физических, так и механических свойств материалов. В связи с этим важнейшей проблемой является определение в многокомпонентных сплавах взаимосвязи между концентрацией добавочных элементов, с одной стороны, и структурой и мартенситными переходами, с другой. Это и явилось целью настоящей работы.

Были получены 12 шестикомпонентных сплавов Ti-Hf-Zr-Ni-Cu-Co, отличающихся концентрациями добавочных элементов (Hf, Zr, Cu,Co) и концентрациями никелевой (Ni+Cu+Co) и титановой (Ti+Hf+Zr) групп. Полученные результаты показали, что все сплавы являются кристаллическими и помимо основной фазы B2 содержат вторичные фазы, состав которых соответствует фазам, наблюдаемым в бинарном сплаве TiNi. Установлено, что в сплавах с низкой (меньше 1R) и средней энтропией смешения (меньше 1.5R) химический состав фазы B2 является однородным. В сплавах с высокой энтропией смешения (более 1.5R) фаза B2 неоднородна по химическому составу. Термообработка при температурах свыше 1000 °C длительностью более 5 часов гомогенизирует состав фазы B2 однако приводит к сильному росту зерен, размер которых меняется от 10 мкм в исходном сплаве до 150 мкм – в гомогенизированном сплаве.

Сплавы с низкой и средней энтропией смешения испытывают мартенситные превращения при охлаждении и нагревании параметры которых определяются химическим составом фазы B2. В сплавах с низкой энтропией основным фактором, влияющим на характеристики фазовых переходов, является концентрация никелевой группы. В сплавах со средней энтропией большее влияние на температуры переходов имеет концентрация добавочных элементов. В сплавах с высокой энтропией мартенситная фаза не образовывалась при охлаждении до -180 °C, однако в фазе B2 возникали деформационные нанодомены, что свидетельствует о том, что в этих материалах мартенситное превращение может быть инициировано напряжением.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (№ 22-19-00169)

ТЕРМОЦИКЛИЧЕСКАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ШЕСТИКОМПОНЕНТНЫХ СПЛАВАХ Ti-Hf-Zr-Ni-Cu-Co

Реснина Н.Н.¹, Беляев С.П.¹, Поникарова И.В.¹, Сибирев А.В.¹, Ребров Т.В.¹, Кальницкая М.В.¹, Иванов А.М.¹, Бикбаев Р.М.¹, Базлов А.И.^{1,2}, Андреев А.В.³

¹Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: resnat@mail.ru

²Национальный исследовательский технологический университет "МИСиС", Россия, Москва

³Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Россия, Москва

Сплавы с эффектом памяти формы являются перспективными для использования в приводах многократного действия, в которых элемент из сплава TiNi подвергается многократным теплосменам через температурный интервал мартенситного перехода. В связи с этим, важным является термоциклическая стабильность мартенситных переходов, т.е. неизменность температур и последовательности мартенситных превращений при термоциклировании. Самыми широко применяемыми материалами с памятью формы являются сплавы на основе TiNi, однако их термоциклическая стабильность является достаточно низкой. Поэтому важной задачей является улучшение стабильности параметров мартенситных переходов в этих материалах при многократных теплосменах. Предполагается, что причиной недостаточной стабильности свойств является низкий предел дислокационного скольжения, что обеспечивает зарождение и размножение дислокаций при повторяющихся мартенситных переходах. Полагают, что изменение плотности дислокаций является основной причиной понижения температур мартенситных переходов с циклами, поэтому все подходы для улучшения стабильности сплавов TiNi связаны с увеличением дислокационного предела текучести. Другим способом упрочнения является использование многокомпонентных сплавов на основе TiNi, в которых движение и размножение дислокаций ограничено за счет твердорастворного упрочнения. В связи с этим целью настоящей работы явилось исследование изменения параметров мартенситных переходов в шестикомпонентных сплавах Ti-Hf-Zr-Ni-Cu-Co, в которых атомы гафния, циркония, меди и кобальта занимают места титана и никеля, что и приводит к упрочнению материала.

В работы мартенситные превращения исследовали в 8 сплавах Ti-Hf-Zr-Ni-Cu-Co, отличающихся как концентрациями добавочных элементов от 1 до 23 ат.%, так и концентрациями титановой и никелевой групп. Исследование механического поведения и микротвердости подтвердили, что увеличение концентрации добавочных элементов приводит к твердорастворному упрочнению. Вместе с тем, данные дифференциальной сканирующей калориметрии и изменения электросопротивления показали, что сплавы являются очень нестабильными при термоциклировании. При многократных теплосменах температуры мартенситных переходов в шестикомпонентных сплавах уменьшались более, чем на 40 °С, а теплота превращения падала более, чем в два раза. При этом интервалы превращений и температурный гистерезис изменялись незначительно. Таким образом, результаты работы показали, что твердорастворное упрочнение не улучшает термоциклической стабильности мартенситных переходов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (№ 22-19-00169)

MECHANISMS OF DIFFUSION-CONTROLLED ANELASTIC RELAXATION IN TERNARY Fe-(Al+Ga) ALLOYS

**D.G. Chubov^{1*}, A. A. Shcherbakov¹, J. Cifre², H.W. Chang³, S.U. Jen⁴,
V.V. Palacheva¹, A.M. Balagurov^{1,5}, I.S. Golovin¹**

¹ National University of Science and Technology MISIS, Leninsky Ave. 4, 119049, Moscow, Russia

² Universitat de les Illes Balears, Ctra. De Valldemossa, km.7.5, E-07122 Palma de Mallorca, Spain

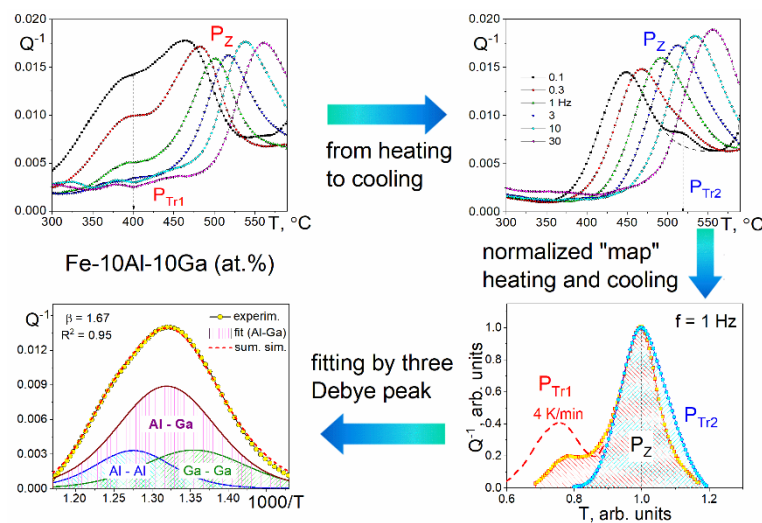
³ Department of Physics, National Chung Cheng University, Chia-Yi, 621 Taiwan

⁴ Institute of Physics, Academia Sinica, Taipei, 115 Taiwan

⁵ Joint Institute for Nuclear Research, 141980, Dubna, Russia

*corresponding author: daniilneo00@gmail.com

Anelastic relaxation at elevated temperatures (300-600°C) in binary and ternary Fe-(Al+Ga) alloys with different amount and Al/Ga ratio is experimentally studied and analysed. Two transient effects due to irreversible annihilation of quenched vacancy and reversible order (short range D0₃) ↔ disorder (A2) transition overlap with thermally activated Zener relaxation (Figure).



‘Map’ of these effects at heating and cooling for sub-resonance Hertz-range frequencies is built to demonstrate similarities between Fe-Al, Fe-Ga and Fe-Al-Ga alloys, and to find out quantitative influence of alloys chemical composition and measuring frequency on these effects and their combinations. Zener relaxation, which activation energy is close to the activation energy of substitute atoms in α -Fe, is discussed for ternary alloys in terms of contribution of Al-Al, Ga-Ga and Al-Ga atom pairs reorientation.

Financial support from the Russian Science Foundation project No. 19-72-20080 is greatly acknowledged.

МЕХАНИЗМЫ ФОРМИРОВАНИЯ И НАКОПЛЕНИЯ РАЗОРИЕНТИРОВОК В ДЕФОРМИРУЕМЫХ МЕТАЛЛАХ И СПЛАВАХ

Черепанов Д. Н.^{1,2}, Соловьёва Ю. В.¹, Старенченко В. А.¹

¹Томский государственный архитектурно-строительный университет,

²Томский университет систем управления и радиоэлектроники,

Томск, Россия, d_n_ch@mail.ru

Хорошо известно влияние разориентированных структур на эксплуатационные и технологические свойства металлов и сплавов. Однако несмотря на многочисленные исследования, удалось лишь определить средние величины естественных параметров структур таких как угол разориентировки и размер области, окруженной границами разориентации. Относительно же механизмов появления границ разориентировки, увеличения разориентировки этих границ и увеличения объёмной плотности границ высказаны только некоторые предположения и предложены некоторые феноменологические модели.

Полное исследование вопроса возможно лишь на основе адекватной математической модели эволюции всей деформационной дефектной системы, верифицированной всем спектром экспериментальных данных [1]. Обязательными элементами такой модели являются соотношения связывающие интенсивности изменения параметров разориентированных структур с характеристиками всех элементов дефектной системы.

Представленная работа посвящена исследованию механизма перестроения краевых дислокационных скоплений (рис.) на границах зон сдвига в дислокационные стенки наклона под воздействием потоков точечных дефектов, генерируемых при неконсервативном движении порогов на винтовых сегментах дислокационных петель, выпускаемых дислокационными источниками. Кроме того, рассматривается механизм роста разориентировки при слиянии стенок наклона, возникающих при импульсной работе источника, и механизм перестроения скоплений малоугловых стенок с максимально возможной разориентировкой в высокоугловые границы, из которых далее формируются границы зёрен, что ведёт к дальнейшему измельчению структуры, до момента интенсификации механизмов динамической рекристаллизации достаточной, чтобы уравновесить интенсивность измельчения структуры.



Рис. Схема перестроения скоплений в малоугловые стенки наклона.
а – силовое перестроение под действием динамического напряжения,
б – перестроение после достижения неустойчивого состояния равновесия

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FEMN-2023-0003).

Литература

1. Старенченко В.А., Черепанов Д.Н., Селиваникова О.В. Моделирование пластической деформации кристаллических материалов на основе концепции упрочнения и отдыха в ГЦК-металлах // Изв. ВУЗов. Физика. – 2014. – Т. 57. – № 2. – С. 4-14.

ЭЛЕКТРОННАЯ МИКРОСКОПИЯ КРИСТАЛЛОВ NaLaMoO_4 , ЛЕГИРОВАННЫХ Ce и Er

Суворова Е.И.

Федеральный научно-исследовательский центр "Кристаллография и фотоника"
РАН Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова РАН, Москва, Россия

E-mail: suvorova@crys.ras.ru

Двойной молибдат с формулой $\text{Na}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{MoO}_4$ (NLM) и активными примесями редкоземельных элементов (Ce^{3+} , Nd^{3+} , Sm^{3+} , Eu^{3+} , Tm^{3+} и др.) представляет интерес в качестве лазерного материала с диодной накачкой, хорошо подходящего для производства тонких лазеров на микрочипах. Среди ряда требований, которым должны удовлетворять лазерные материалы, одним из важнейших условий является высокая оптическая однородность. На примере исследования микроструктуры кристаллов NLM с примесью ионов Ce и Er методами СЭМ/ПЭМ и энергодисперсионного рентгеновского микроанализа (ЭДС) в работе показано, что существует вероятность образования оксидов Ce после охлаждения до отжига, при этом выделения фазы CeO_2 наблюдаются всегда после высокотемпературного отжига.

Исследовались кристаллы, выращенные методом Чохральского и отожженные при 700-1000°C с номинальным составом $\text{Na}_{0.5}\text{La}_{1-x}\text{Ce}_x\text{Er}_{0.005}\text{MoO}_4$, где $x=0.125, 0.15$ и 0.25 . Такой состав означает, что концентрации Ce должны быть 2.1, 2.5 и 4.2 ат.%, соответственно, и 0.1 ат.% Er. Предполагается, что все легирующие ионы Ce и Er замещают ионы La в тетрагональной решетке $I4_1/a$. По результатам ЭДС анализа образцов $\text{Na}_{0.5}\text{La}_{1-x}\text{Ce}_x\text{Er}_{0.005}\text{MoO}_4$ показано, что концентрация Ce внутри кристалла уменьшается после отжига, так как происходит выделение ограниченных нанокристаллов CeO_2 с линейным размером порядка 200 – 300 нм и средней плотностью рапределения $\approx 1 - 5$ кристалл/мкм³. Кристаллы CeO_2 распределены в матрице весьма неоднородно, часто образуют цепочки длиной несколько десятков мкм. Более крупные (до 0.5 мкм) кристаллы CeO_2 образуются в сочетании с округлыми (диаметром несколько мкм) выделениями непрореагировавших исходных материалов со значительным количеством углерода из карбоната натрия.

Кубическая фаза CeO_2 определена из картин электронной дифракции в ПЭМ, установлены несколько ориентационных соотношений NLM/ CeO_2 и уровень деформации решетки. Спектроскопия энергетических потерь электронов подтвердила трехвалентное состояние Ce в матричном кристалле NLM и в выделившемся до отжига оксиде Ce_2O_3 ; и четырехвалентное состояние Ce в выделившихся после отжига нанокристаллах CeO_2 , (Рис.1).

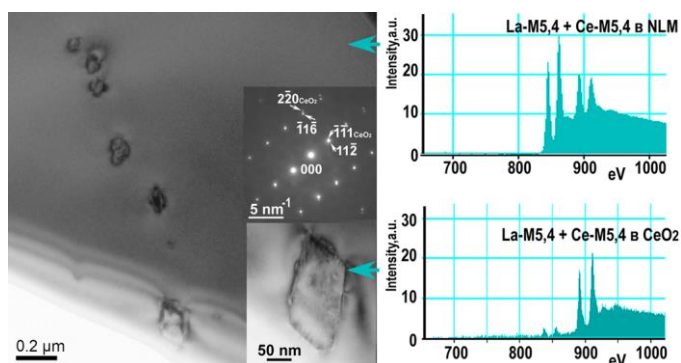


Рис.1 Нанокристаллы CeO_2 в матрице NLM, электронограмма от CeO_2/NLM и спектры характеристических потерь энергии электронов от матричного NLM и кристалла CeO_2 .

СТРУКТУРНО-ФАЗОВАЯ МОДИФИКАЦИЯ ДИФФУЗИОННЫХ БОРИДНЫХ СЛОЕВ ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВОЙ ОБРАБОТКОЙ

Улаханов Н. С.¹, Мишигдоржийн У. Л.², Шин В. И.³, Воробьев М. С.³,
Тихонов А. Г.^{4,5}

¹ИФМ СО РАН, г. Улан-Удэ, Россия, nulahanov@mail.ru

²ИФМ СО РАН, г. Улан-Удэ, Россия, undrakh@ipms.bscnet.ru

³ИСЭ СО РАН, г. Томск, Россия, sheen1996@mail.ru

⁴ИРНИТУ, г. Иркутск, Россия, tihonovalex90@mail.ru

⁵ИФМ СО РАН, г. Улан-Удэ, Россия, tihonovalex90@mail.ru

В настоящее время развитие набирают технологии обработки поверхности металлов и сплавов концентрированными потоками энергии (КПЭ) [1]. Отличие такой обработки от классической химико-термической обработки состоит в быстродействующем высокоэнергетическом воздействии на поверхность обрабатываемого материала, повышающим его функциональные свойства, такие как износостойкость, жаростойкость и коррозионную стойкость в несколько раз [2].

В литературе редко упоминается о возможности использования комбинированных методов обработки, таких как сочетание диффузионного насыщения с электронно-пучковой обработкой (ЭПО). В статье [2] авторы рассматривают применение ЭПО в сочетании с другими технологиями, такими как электровзрывное легирование, электродуговая и электроконтактная наплавка, а также модификация поверхностных слоев аддитивных сплавов. Исследования показали, что при оптимальных режимах ЭПО можно значительно увеличить износостойкость, микротвердость, нанотвердость, модуль Юнга и снизить коэффициент трения.

Целью данной работы является структурно-фазовая модификация импульсным модулированным электронным пучком диффузионных слоев на основе бора и алюминия, сформированных на штамповых сталях 5ХНМ и 3Х2В8Ф, используя уникальные возможности источников электронов «СОЛО» с плазменным катодом, обеспечивающие достижение высокой плотности энергии с возможностью регулировки мощности пучка в течение субмиллисекундной длительности импульса тока пучка [3].

Финансирование: Исследование выполнено при финансовом обеспечении гранта Российского Научного Фонда (проект 19-79-10163-П)

Литература

1. Buchwalder A., Zenker R. Pre- and post-surface treatments using electron beam technology for load-related application of thermochemical and PVD hard coatings on soft substrate materials // Surf. Coat. Technol. – 2019. – 375, P. – 920-932.
2. Комаров Д. В., Коновалов С. В., Жуков Д. В. Анализ современной ситуации в области применения электронно-пучковой обработки различных сплавов. Часть 2 // Ползуновский вестник. – 2022. – № 3. – С. 204-215.
3. Воробьев М. С., Москвин П. В., Шин В. И. Динамическое управление мощностью мегаваттного электронного пучка субмиллисекундной длительности в источнике с плазменным катодом // – 2021. – Т. 47, № 10. – С. 38-41. – DOI 10.21883/PJTF.2021.10.50972.18719

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫЕ АНОМАЛИИ И ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В СЛОИСТОМ КВАЗИОДНОМЕРНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ TiS_3

Горлова И. Г.¹, Покровский В. Я.¹, Гаврилкин С. Ю.², Цветков А. Ю.²,
Болотина Н. Б.³, Иванова А. Г.³

¹ *Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, г. Москва, Россия, gorl@cplire.ru*

² *Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, г. Москва, Россия, gavrs@lebedev.ru*

³ *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, г. Москва, Россия, nb_bolotina@mail.ru*

Особый интерес к исследованию слоистого квазиодномерного полупроводника TiS_3 связан с возможностью образования в этом соединении коллективного электронного состояния из полупроводниковой фазы. При температуре $T_0 \sim 50$ К в TiS_3 обнаружены максимумы производной сопротивления, эффекта Холла, эффекта поля и фотопроводимости, а также смена знака магнетосопротивления. Ниже T_0 резко возрастает нелинейная проводимость [1]. Все эти аномалии можно объяснить образованием электронного или магнитного упорядочения, однако прямых доказательств фазовых переходов до сих пор не было из-за отсутствия детальных исследований кристаллической и электронной структуры TiS_3 при низких температурах.

В настоящей работе, помимо обзора наблюдавшихся аномалий, будут представлены первые результаты измерений параметров кристаллической решетки виссеров TiS_3 в диапазоне температур $25 \text{ К} < T < 300 \text{ К}$ и намагниченности M в различных магнитных полях H при $4 \text{ К} < T < 300 \text{ К}$.

Намагниченность растет с понижением температуры как T^{-1} , что характерно для парамагнетиков. В области T_0 на кривой $M(T)$ наблюдается особенность, вид которой зависит от направления и скорости развёртки температуры, dT/dt . Так, при $|dT/dt| \lesssim 1$ К/мин на кривой при нагреве наблюдается зигзаг, а при охлаждении – плато. Результат свидетельствует о появлении долгоживущих метастабильных электронных состояний в области T_0 и магнитном упорядочении ниже T_0 . Подобные N-образные гистерезисные зависимости $M(T)$ наблюдались в сплавах Гейслера в области температуры структурного перехода из кубической в тетрагональную фазу, при котором изменяется магнитное состояние сплава [2].

На зависимостях $M(H)$, измеренных до 6 Т, наблюдаются нетипичные для парамагнетиков гистерезис и насыщение. Например, при 80 К намагниченность растет как $\log(H)$. Отметим, что недавно в TiS_3 обнаружена логарифмическая релаксация фотопроводимости [3]. Оба результата указывают на широкое распределение по энергиям высот барьеров, отделяющих различные метастабильные состояния.

Рентгеноструктурные исследования параметров элементарной ячейки указывают на структурный переход, также происходящий при T_0 : при 50 К угол моноклинности достигает максимума, а при дальнейшем понижении T уменьшается.

Работа выполнена при поддержке РФФ, проект 22-12-00319.

Литература

1. M. D. Randle, A. Lipatov, I. Mansaray et al. // *Appl. Phys. Lett.* (2021). **118**, 210502-210514
2. В. Hernando et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* (2009) **321**, 763–768
3. И. Г. Горлова и др. // *Труды XXVII Международного симпозиума «Нанозифика и наноэлектроника» 13-16 марта 2023 г. Нижний Новгород . – (2023). – Т. 2. – С. 554-555*

ЛОКАЛЬНАЯ СТРУКТУРА ФЛЮОРИТПРОИЗВОДНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ НА ОСНОВЕ R_2TiO_5 ($R - Sc, Y, Er, Tm, Yb, Lu$)

Ляшенко Л.П.¹, Дремова Н.Н.¹, Тартаковский И.И.², Максимов А.А.²,
Светогоров Р.Д.³, Зубавичус Я.В.³

¹ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, Черноголовка, Россия,
lyash@icp.ac.ru

²Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия

³НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия

В высокодефектных флюоритпроизводных поликристаллических и плавленных твердых растворах (TP) $xR_2O_3 \cdot (1-x)TiO_2$ ($R=Sc: 0.4 \leq x \leq 0.5$; $R=Y, Er, Tm, Yb, Lu: 0.5 \leq x \leq 0.6$) впервые изучены явления порядок-беспорядок методами дифракции монохроматического синхротронного рентгеновского излучения, Раман спектроскопии и СЭМ [1-3]. Установлено образование в процессе синтеза двух кубических фаз одинакового состава: разупорядоченной флюоритоподобной (F) ($Fm\bar{3}m$) и сопряженной с ней с различной степенью упорядочения пироксалоподобной (P) ($Fd\bar{3}m$), состоящей из наномасштабных (<10 нм) и нанокристаллических доменов. Во флюоритной установке параметры кристаллических решеток F - и P -фаз различаются незначительно, поэтому сопряжение их решеток происходит через интерфейсы, создаваемые дислокациями. В области существования TP параметры кристаллических решеток F -фаз подчиняются правилу Вегарда. В отличие от рентгенофазового анализа, где основные дифракционные отражения F - и P -фаз практически не разрешаются, в Раман-спектрах их интенсивные полосы находятся в различных частотных областях ($\sim 100-190, 290-390$ cm^{-1} (P) и $720-775$ cm^{-1} (F)), что позволило достоверно установить присутствие P -фаз в образцах изученных систем. По данным СЭМ микроструктура поликристаллов R_2TiO_5 состоит из зерен, имеющих свою субструктуру – нанодомены размером $\sim 10 \div 400$ нм (рис. 1а). Микроструктура плавленных кристаллов содержит нанодомены размером $\sim 10 \div 30$ нм (рис. 1б).

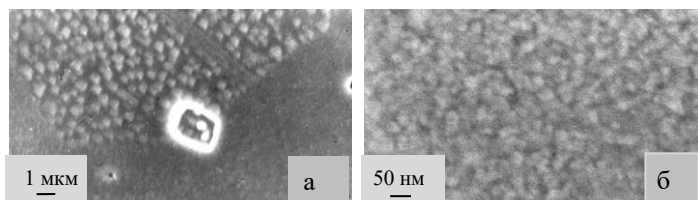


Рис. 1. В качестве примера приведены микрофотографии поверхности Er_2TiO_5 : а – поликристалл, б – плавленный кристалл.

Образование с различной степенью упорядочения пироксалоподобных фаз во флюоритной матрице изученных TP обусловлено внутренними напряжениями, возникающими из-за высокой плотности структурных дефектов в их элементарных ячейках. Полученные материалы обладают высокой удельной поверхностью и могут использоваться в качестве катализаторов и их носителей, а также для других целей.

Работа поддерживается государственным заданием Министерства Науки и Высшего Образования Российской Федерации, номер государственной регистрации АААА-А19-119061890019-5

1. Lyashenko L.P., Shcherbakova L.G., Karelin A.I., Smirnov V.A., Kulik E.S., Svetogorov R.D., Zubavichus Ya.V. // Inorg. Mater. – 2016. – V. 52. – № 5. – P. 483-489.
2. Lyashenko L.P., Shcherbakova L.G., Tartakovskii I.I., Maksimov A.A., Svetogorov R.D., Zubavichus Ya.V., Kolbanev I.V // Inorg. Mater. – 2020. – V. 56. – № 2. – P. 190-197.
3. Lyashenko L.P., Shcherbakova L.G., Tartakovskii I.I., Maksimov A.A., Svetogorov R.D., Zubavichus Ya.V., Kolbanev I.V // Inorg. Mater. – 2022. – V. 58. – № 4. – P. 379-388.

ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК ВИСМУТ-СУРЬМА ПРИ ДЕФОРМАЦИИ РАСТЯЖЕНИЯ В ПЛОСКОСТИ ПЛЕНКИ

Суслов А. В., Герега В. А., Глебов М. Д., Грабов В. М., Комаров В. А.

РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия, a.v.suslov@mail.ru

Ввиду малой величины непрямого энергетического перекрытия, большой длины свободного пробега носителей заряда, их малой эффективной массы висмут и его твердые растворы являются одними из интересных модельных материалов при исследовании эффектов, связанных с деформацией кристаллической структуры. Так, например, в работах [1–3] показаны изменения зонной структуры пленок под действием деформации, включая переходы полуметалл-полупроводник и переходы в нетривиальное топологическое состояние.

Одним из типов деформации тонких пленок, который проявляется при температурных исследованиях, является деформация в плоскости пленки, вызванная различием коэффициентов температурного расширения (КТР) материала пленки и подложки. Величина деформации определяется разностью КТР материалов пленки и подложки и разностью между температурой пленки и температурой ее формирования. Таким образом она может принимать лишь дискретные значения при заданной температуре.

В данной работе представлены результаты исследования электрических и гальваномагнитных свойств пленок висмута и висмут-сурьма (до 12 ат.% сурьмы) на стекле и кремнии в условиях деформации растяжения, вызванной купольным изгибом подложки [4]. Купольный изгиб позволяет получить деформацию одной и той же пленки в широком диапазоне значений непосредственно в ходе исследования. Подложки из стекла обладают наиболее близким к висмуту среди диэлектрических упругих материалов, доступных для исследования, и позволяют получить относительную деформации по площади до 0.5–0.6 %, относительно свободной пленки висмута, если принять за температуру формирования температуру отжига пленки 250°C. Расширить этот диапазон до 0.8 % и более позволяет использование подложек из кремния.

В работе был получен массив экспериментальных данных удельного сопротивления, магнетосопротивления и коэффициента Холла пленок висмута и висмут-сурьма при комнатной температуре и температуре жидкого азота. Показан рост удельного сопротивления при увеличении деформации растяжения. Магнетосопротивление изменяется слабо с увеличением деформации, свидетельствуя о слабом изменении подвижности носителей заряда. Коэффициент Холла увеличивается по абсолютной величине при растяжении пленки. Полученные результаты качественно согласуются с представлениями, полученными при исследовании пленок системы висмут-сурьма на различных подложках, однако дают более подробные зависимости от величины деформации в пленке. Результаты позволяют лучше понять закономерности изменения физических свойств пленок на различных подложках.

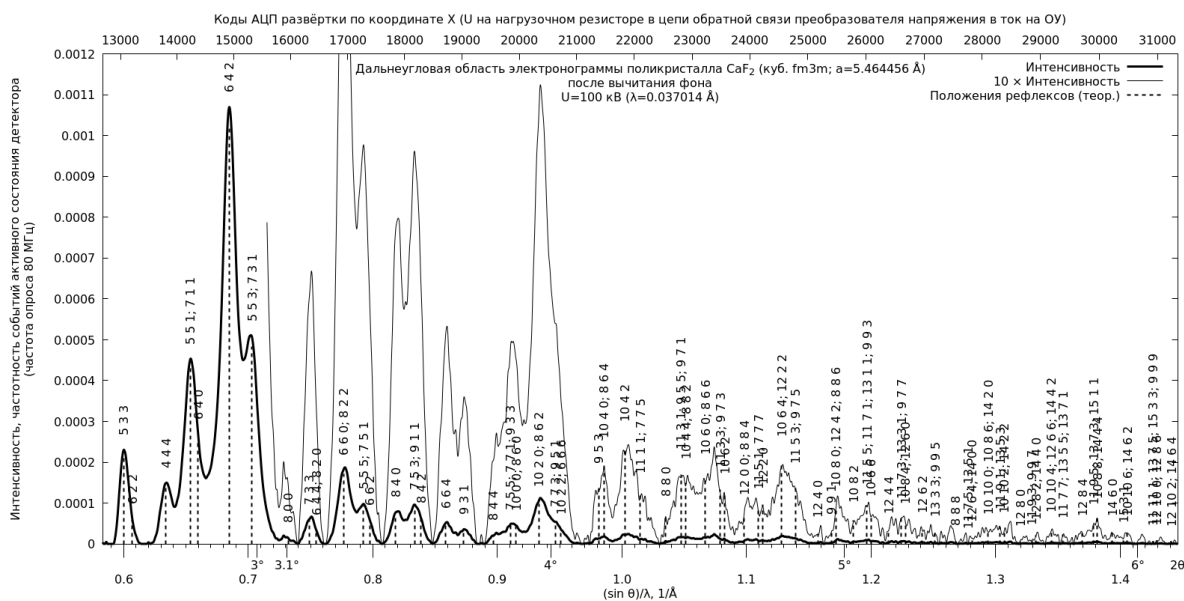
Исследование выполнено в рамках государственного задания при финансовой поддержке Минпросвещения России (проект № VRFY-2023-0005).

1. T. Hirahara, N. Fukui, T. Shirasawa et al. (2012) *Phys. Rev. Lett.*, 109, 227401.
2. I. Aguilera, C. Friedrich, S. Blügel (2015) *Phys. Rev. B* 91, 12, 125129.
3. C.Y. Wu, J.C. Han, L. Sun et al. (2018) *J. Phys. Condens. Matter*, 30, 28, 285504.
4. A.V. Suslov, V.A. Gerega, V.M. Grabov et al. (2022) *Semiconductors*, 56, 1, 22–24.

УГЛОВОЕ РАЗРЕШЕНИЕ В ПРЕЦИЗИОННОЙ ЭЛЕКТРОНОГРАФИИ

Кулыгин А. К.¹, Авиллов А. С.², Сульянова Е. А., Кулыгин К. В., Соболев Б. П.
 ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия
¹kuligin57@gmail.com; ²avilovanatoly@mail.ru

Актуальной задачей электронной дифрактометрии в прецизионной электронографии является получение информации о максимальном количестве дифракционных рефлексов с максимально возможной точностью с целью получения информации о структуре и физических свойствах исследуемого вещества, уточнения соответствующих параметров модели. Эта задача связана с существенными техническими сложностями, индивидуальными для каждого вещества и каждого эксперимента. В настоящей работе осуществлена модернизация системы измерений в электронографе ЭМР-102 (предшествующий этап работы описан в [1]). Для синхронной регистрации сигналов электронно-оптического преобразователя (детектора) и развёртки применён АЦП ADLINK PCIE-9834, использовано 2 (из 4) каналов 16 бит 80 МГц. Для генерации опорного напряжения развёртки по координате X использована микросхема сигнального ЦАП РСМ4104 разрешением 24 бит (Texas Instruments) в составе генератора LTR-35 (ООО «Л Кард»). Применено управление конденсорными линзами по той же схеме, что и развёртками. Проведены измерения для поликристаллического образца CaF₂, выращенного методом Бриджмена с последующим напылением в вакууме на углеродную плёнку из разогретой корзиночки.



Показана (см. рисунок) возможность измерения рефлексов в дальнеугловой области $(\sin \theta)/\lambda \leq 1.18 \text{ \AA}^{-1}$ с разрешением несколько сотен точек на рефлекс (см. рис. – верхняя шкала по оси X). Угловое разрешение – лучше $0.1^\circ 2\theta$ и $0.02 \text{ \AA}^{-1} (\sin \theta)/\lambda$ (см. на рис. рефлекс [8 0 0] в области $2\theta=3.1^\circ$). Рефлексы в области $2\theta > 5^\circ$ сливаются ввиду их естественной ширины и близкого расположения друг к другу, это – физическое ограничение, не обусловленное методикой измерений.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

Литература

1. Кулыгин А.К., Кулыгин К.В., Авиллов А.С. Новые подходы к прецизионным измерениям дифракционных картин в электронографии // Кристаллография. 2020. Т. 65. № 2. С. 325-334.

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ Co, РАЗДЕЛЕННЫХ СЛОЕМ Pd

Кабанов Ю.П., Шашков И.В., Горнаков В.С.

Институт Физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия,

E-mail: gornakov@issp.ac.ru

Магнитные тонкопленочные структуры с перпендикулярной магнитной анизотропией в которых два ферромагнитных (ФМ) слоя разделены немагнитной (НМ) прослойкой, являются перспективными кандидатами для создания магнитных запоминающих устройств с произвольным доступом и устройств спинтроники. Перемагничивание, кинетика и релаксация доменной структуры таких синтезированных пленок зависят от толщины НМ слоя [1, 2]. В данном сообщении представлены результаты исследования движения доменных границ и формирования обменной связи между ФМ слоями в сверхтонкой структуре Co/Pd/Co. С использованием Керр-микроскопии изучено влияние толщины немагнитной прослойки и температуры на величину межслоевой обменной связи в ультратонкой гетерофазной структуре Ta(2нм)/Pd(1нм)/Co(0,4нм)/Pd(tнм)/Co(0,4нм)/Pd(1нм)/Ta(2нм). Эта структура была нанесена магнетронным распылением на окисленную кремниевую подложку площадью 5x6 мм² при комнатной температуре. Толщина прослойки платины t равномерно изменялась от 4 нм до 6 нм (Рис.1а). Формирование и эволюция доменов были изучены с помощью магнитооптического эффекта Керра (Рис.1б).

Исследовано смещение доменных границ (ДГ) от толщины Pd в области образца с ферромагнитной межслоевой обменной связью в диапазоне температур от 220К до 300К. Показано, что независимое смещение ДГ в слоях в перпендикулярном магнитном поле происходит в диапазоне толщин $t_{CR} < t < t_0$. Установлена нелинейная зависимость этого смещения от величины внешнего магнитного поля в этой области толщин (Рис.2). Показано, что равновесное положение ДГ достигается в зависимости от величины поля, толщины немагнитной прослойки и температуры $x(H, t, T)$. Величина x определяется балансом сил, действующих на ДГ. Рассмотрен механизм стабилизации доменных границ вблизи $t = t_{CR}$ при независимом движении границ в слоях. Получена зависимость энергии межслоевой обменной связи $J(t, H)$ от толщины немагнитной прослойки во всем диапазоне температур.

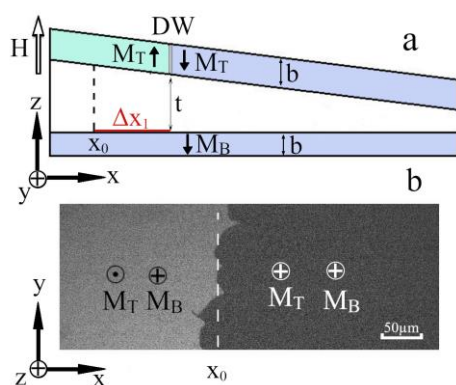


Рис.1 Схематическое (а) и магнитооптическое (б) изображения доменной структуры в образце Co/Pd/Co.

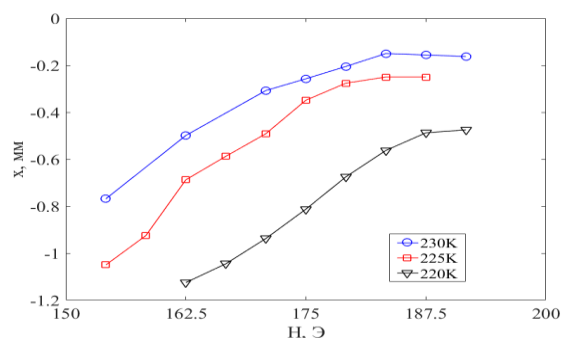


Рис.2 Зависимость смещения доменной границы от величины магнитного поля при различных температурах.

Литература

1. Omelchenko P., Montoya E., Girt E., Heinrich B.// J. Exp. Theor. Phys. – 2020. – №131. – P. 113–129.
2. Shashkov I.V., Kabanov Yu.P., Tikhomirov O.A., and Gornakov V.S.// Magnetism. – 2022. – № 2. – P. 186–194.

ПОВЕРХНОСТНАЯ КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ АМОРФНЫХ МИКРОПРОВОДОВ СОСТАВА $Fe_{73,8}Si_{13}B_{9,1}Cu_1Nb_{3,1}$

Фукс А.А.^{1,2}, Абросимова Г.Е.¹, Аксенов О.И.¹, Аронин А.С.^{1,2}

¹*Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка, Россия;*

²*НИУ Высшая школа экономики, г. Москва, Россия*

artemfux@yandex.ru

Аморфные микропровода в стеклянной оболочке в процессе изготовления методом Улитовского–Тейлора подвергаются резкому охлаждению, благодаря чему в них индуцируются неоднородно распределённые по объёму внутренние механические напряжения. Как было показано в работе [1], из решения уравнения теплопроводности и расчёта компонент тензора механических напряжений следует, что приповерхностная область микропровода подвержена в основном действию сжимающих напряжений, направленных вдоль оси микропровода, их величина может достигать единиц ГПа. В то же время центральный объём микропровода находится под действием более слабых по величине (порядка сотен МПа) растягивающих осевых напряжений. Помимо этого, существует вклад в общую величину внутренних напряжений, связанный с различием в коэффициентах термического расширения между стеклянной оболочкой и металлической сердцевиной микропровода. Данная работа посвящена изучению неоднородной кристаллизации под действием внутренних напряжений микропроводов состава $Fe_{73,8}Si_{13}B_{9,1}Cu_1Nb_{3,1}$. При термической обработке аморфных материалов из данного сплава на начальных этапах происходит выделение из аморфной матрицы нанокристаллов твердого раствора кремния в ОЦК-железе α -Fe(Si). [2]. Ранее в работах [3, 4] было доказано, что внутренние напряжения влияют на процесс кристаллизации микропроводов $Fe_{73,8}Si_{13}B_{9,1}Cu_1Nb_{3,1}$ и $Fe_{77,5}Si_{13,5}B_9$. Так, с помощью рентгенографических исследований микропроводов после термообработки при 753 К и 703 К в течение 20 минут с химически удалённой приповерхностной областью было показано, что при одинаковых условиях термообработки объемная доля нанокристаллов, сформированных в области действия сжимающих напряжений, т.е., вблизи поверхности, больше, чем в объеме микропровода, подверженного действию растягивающих напряжений. Тем не менее, указанных условий термообработки недостаточно для образования у поверхности микропровода наиболее оптимальной с точки зрения магнитных свойств нанокристаллической структуры. В свою очередь, формирование в микропроводе неоднородной кристаллической структуры вида “аморфная центральная часть и аморфно-нанокристаллическая приповерхностная область” потенциально позволит влиять на величину ГМИ-эффекта, наблюдаемого в аморфных ферромагнитных проводах и имеющего широкий ряд практических применений. Поиск условий термообработки, при которых и формируется такая структура, является целью данной работы. Работа выполнена при финансировании РНФ (проект 22-72-00067).

Литература

1. Chiriac, H., Ovari, T. A., Pop, G. // *Phys. Rev. B.* – 1995. – V.52. – pp.10104-10113.
2. Herzer, G. // *Phys. Scripta.* – 1993. – V. T49A. – pp. 307-314.
3. Фукс, А.А., Абросимова, Г.Е., Аксенов, О.И., Аронин, А.С. // *ФТТ.* – 2023. – Т. 65. – №1. – с. 35-38.
4. Fuks, A., Abrosimova, G., Aksenov, O., Aronin, A. // *Crystals.* – 2022. – V. 12. – №10. – p. 1494

СЛОИСТЫЕ КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ Ti/Nb/Ta/КЕРАМИКА, ПОЛУЧЕННЫЕ В УСЛОВИЯХ СВС

Камынина О. К.¹, Вадченко С. Г.², Ковалев И. Д.², Прохоров Д. В.¹

¹ИФТТ РАН, Черногловка, Россия, kok@issp.ac.ru

²ИСМАН, Черногловка, Россия, vadchenko@ism.ac.ru

Слоистые композиционные материалы, состоящие из слоев металла и керамики (композитная сэндвич-структура) представляют интерес для авиационной, аэрокосмической, строительной, автомобильной техники и других областей промышленности благодаря сочетанию свойств металла и керамики (пластичность, твердость, коррозионная стойкость и т.д.). Основное преимущество слоистых композитов – способность обеспечить сложный набор требуемых свойств. Например, уменьшение массы конструкции при сохранении или улучшении термомеханических, механических и коррозионных свойств, таких как прочность, сопротивление усталости, ползучести, окислению [1–3].

Цель данной работы – экспериментальное исследование процессов, протекающих при синтезе слоистых композиционных материалов Ti/Nb/Ta/КЕРАМИКА в режиме горения (СВС – самораспространяющийся высокотемпературный синтез).

Исходные образцы изготавливали в виде сэндвич-образцов из металлических фольг (Ti, Ta, Nb, Ni) и реакционных лент, прокатанных из порошковых смесей (Ti + 1.7В, Ti + 0.65С, 5Ti + 3Si), которые при горении не только формировали слой металлокерамики, но и являлись энергетическим элементом для соединения слоев образца. Выбор слоев для сэндвич-образцов проводился с учетом температур плавления металлов, температуры горения лент, прокатанных из порошковых смесей, и коэффициентов термического расширения. Синтез проводили в реакционной камере в среде аргона при атмосферном давлении [4]. Микроструктура, элементный и фазовый составы синтезированных материалов были изучены методами СЭМ и РФА. Прочностные характеристики полученных композитов определяли по схеме трехточечного нагружения при температурах 25°C и 1100°C в атмосфере аргона.

В результате проведенных экспериментов, в режиме горения получены облегченные слоистые композиты, состоящие из металлических фольг Ti, Ta, Nb и металлокерамики на основе боридов титана, карбида титана и силицидов титана. Формирование тонких промежуточных слоев из металлокерамики и эвтектических растворов обеспечивает синтезированным многослойным материалам хорошие прочностные свойства (87 МПа при 1100°C). Установлено, что образование слоистых композитов в режиме горения при использовании реакционных лент и металлических фольг происходит за счет взаимной пропитки, диффузии и химических реакций.

Литература

1. Liu Ya., Li M., Lu X., Zhu X. // *Metals*. – 2021. – no. 11. – P. 1197, doi: 10.3390/met11081197
2. Ghasali Eh., Ghahremani D., Orooji Ya. // *Jour. of Scien.: Adv. Mater. Devic.* – 2021. – vol. 6. – P. 435–445, doi: 10.1016/j.jsamd.2021.04.003
3. Le V. T., Ha N. S., Goo N. S. // *Composites Part B*. – 2021. – vol. 226. – P. 109301. doi: 10.1016/j.compositesb.2021.109301
4. Kamynina O.K., Vadchenko S.G., Shkodich N.F., Kovalev I.D. // *Metals*. – 2022. – vol. 12. – no. 1. – P. 38. doi: 10.3390/met12010038

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРЕВРАЩЕНИЙ ЧАРОИТА ПРИ ТЕРМИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Гавриличева К.А.¹, Баркалов О. И.¹ Ионов А. М.¹, Шулятьев Д. А.²

¹ИФТТ РАН им. Ю.А. Осипьяна, Черногоровка, Россия, [Xenia.gavrilicheva@issp.ac.ru](mailto: Xenia.gavrilicheva@issp.ac.ru)

²Лаборатория моделирования и разработки новых материалов, НИТУ МИСИС, Москва, Россия

Проведены исследования превращений, происходящих в чароите при нагреве до $\sim 1300^\circ\text{C}$ методами масс-спектрометрии, дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК-ТГ), порошковой рентгеновской дифракции и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС). Было показано методом ДСК-ТГ, что нагрев образца исходного чароита до $\sim 500^\circ\text{C}$ приводит к потере кристаллизационной воды, в интервале температур $500\div 800^\circ\text{C}$ происходит разложение карбонатной составляющей минерала с выделением углекислого газа. При температурах выше 800°C начинается превращение чароита в псевдоволластонит [1]. Этот переход завершается плавлением псевдоволластонитной фазы при температуре около 1100°C . В связи этим попытки вырастить монокристаллическую форму чароита бестигельной зонной плавкой с оптическим нагревом оказались безуспешными.

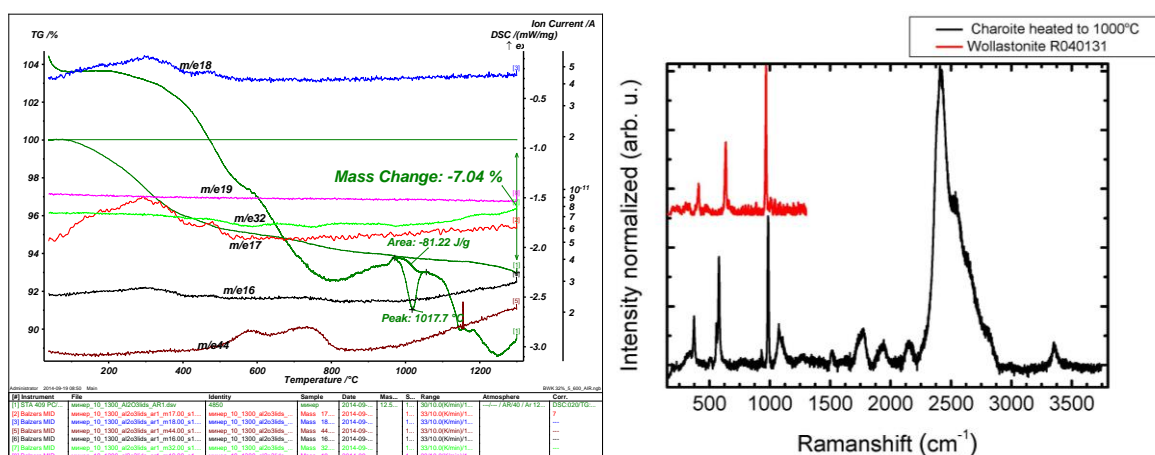


Рис.1. ДСК-ТГ спектры (слева) и спектры КРС чароита после термического воздействия

Однофазное состояние исходного чароита и образца, нагретого до $\sim 1300^\circ\text{C}$ (псевдоволластонит) было подтверждено рентгеновской дифракцией и КРС спектроскопией. В спектрах КРС как исходного, так и конечного состояний наблюдалась широкая интенсивная полоса в интервале частот $2300\div 3000\text{ cm}^{-1}$, что соответствует длине волны $\sim 610\text{ nm}$, в красной области спектра. Эта полоса может быть вызвана люминесценцией ионов металлов, входящих в состав чароита и псевдоволластонита, чем объясняется розовый цвет образца после зонной плавки.

Литература

1. M. V. Marchuk et al., *Geodynamics & Tectonophysics* 2016 Volume 7 Issue 1 Pages 105–118

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В МЕТАСТАБИЛЬНОМ СПЛАВЕ Fe-39.5Ga МЕТОДОМ ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ*

Вершинина Т. Н.¹, Сумников С.В.¹, Самойлова Н.Ю.¹, Балагуров А.М.¹,
Палачева В.В.², Головин И.С.²

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия,

vershinina@nf.jinr.ru

²НИТУ «МИСИС», Москва, Россия, i.golovin@misis.ru

Настоящая работа является естественным продолжением цикла работ, посвященных изучению особенностей структурной организации и фазовых переходов в Fe-Ga сплавах с содержанием галлия > 30 ат.% [1, 2]. Исследования эволюции структуры сплава Fe-39.5Ga, закаленного из расплава, проводились в режиме непрерывного сканирования по температуре методом дифракции нейтронов. В отличие от сплавов с (31-35) ат.% Ga в Fe-39.5Ga помимо фазы на основе ОЦК решетки и интерметаллида Fe₁₃Ga₉, были зафиксированы интерметаллиды α-Fe₆Ga₅ и Fe₁₃Ga₁₃. Выделение последнего является нехарактерным с точки зрения диаграммы состояния Fe-Ga.

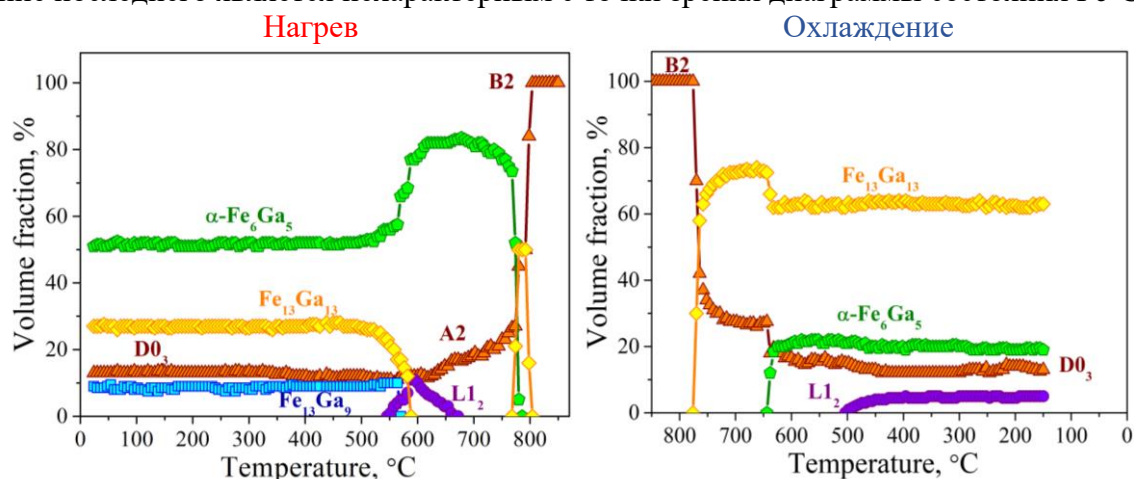


Рисунок 1. Эволюция фазового состава сплава Fe-39.5Ga в процессе нагрева до 850 °С и последующего охлаждения

Изменения фазового состава в процессе нагрева до 850 °С и последующего охлаждения со скоростью 2 град/мин приведены на рисунке 1. Как и в сплавах с меньшей концентрацией галлия Fe-(31-35)Ga, области существования наблюдаемых фаз в сплаве Fe-39.5Ga несколько смещены и соответствуют областям фазовой диаграммы Fe-Ga с большими концентрациями галлия. Вероятной причиной такого поведения является сильно замедленное протекание диффузии. Соответственно, несмотря на проведение полного цикла нагрева и охлаждения, сплав остается в неравновесном состоянии. Об этом свидетельствует присутствие в сплаве при охлаждении метастабильных фаз D0₃ и Fe₁₃Ga₁₃.

*Работа выполнена в рамках проекта № 22-42-04404 РФФ

Литература

1. Vershinina T.N., Samoylova N.Yu., Sumnikov S.V., Balagurov A.M., Palacheva V.V., Golovin I.S. // JALCOM. – 2023. – № 934. 167967.
2. Vershinina T.N., Bobrikov I.A., Sumnikov S.V., Balagurov A.M., Mohamed A.K., Golovin I.S. // JALCOM. – 2021. – № 889. 161782.

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ АТОМОВ Nd НА СТРУКТУРУ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$, $(\text{La}_{0.4}\text{Nd}_{0.6})_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ И $\text{Nd}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ СЕМЕЙСТВА ЛАНГАСИТА

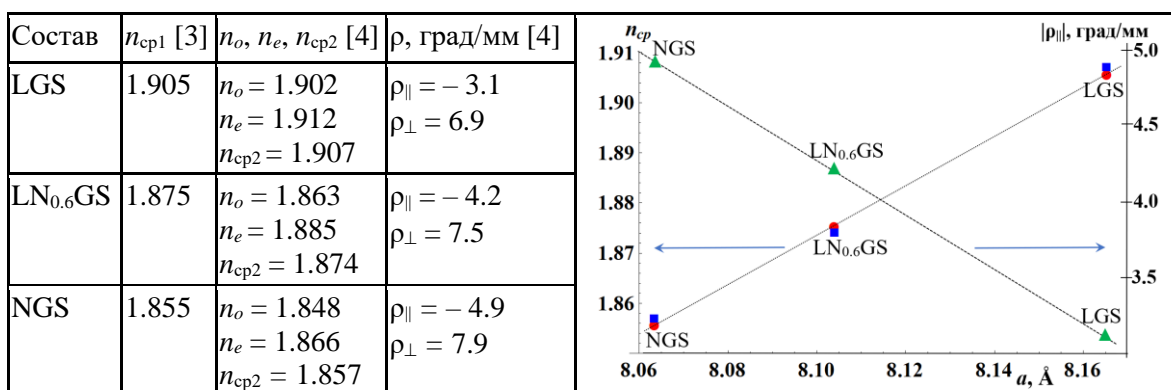
Т.Г. Головина, А.Ф. Константинова, А.П. Дудка, А.В. Бутагин

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия, tatgolovina@mail.ru

Ацентричные кристаллы семейства лангасита $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ (LGS) [1] имеют оптимальный набор механических, оптических, акустических и пьезоэлектрических характеристик для практического применения. Целью настоящей работы является сравнительное исследование оптических свойств и структуры кристаллов LGS, $(\text{La}_{0.4}\text{Nd}_{0.6})_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ ($\text{LN}_{0.6}\text{GS}$), $\text{Nd}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ (NGS), выращенных из расплава [1].

Рентгеноструктурные исследования LGS, $\text{LN}_{0.6}\text{GS}$ и NGS при 295 К подтвердили пр. гр. $P321$, $Z = 1$ и установили параметры элементарной ячейки a и c , равные 8.1652(6) и 5.0958(5); 8.10403(3) и 5.07565(6); 8.06449(3) и 5.06143(2) Å [2]. При исследовании NGS [2] определена структурная основа хиральности кристаллов всего семейства как следствие спиралевидных областей электронной плотности. В указанных кристаллах катионная позиция жесткого базового кислородного тетраэдра заселена атомами двух сортов, Si:Ga=1:1. Переход $\text{La} \rightarrow \text{Nd}$ не затрагивает базовую структуру, но должен менять пьезо- и оптические свойства кристаллов, т.к. изменяются характеристики подвижных атомов в большой полости.

С использованием метода молекулярных рефракций [3] и программы WinOptAct [4] по структурным данным проведен расчет показателей преломления n_o , n_e и удельного вращения плоскости поляризации света ρ (ρ_{\parallel} – в направлении оптической оси, ρ_{\perp} – в перпендикулярном направлении [5]) для длины волны $\lambda = 0.633$ мкм. Рассчитанные величины для LGS сравнивали с экспериментальными данными [5]. Показано, что показатели преломления уменьшаются в ряду LGS, $\text{LN}_{0.6}\text{GS}$, NGS, а величины ρ_{\parallel} и ρ_{\perp} увеличиваются. При этом зависимости $n_{\text{ср}}$ и ρ_{\parallel} от параметров ячейки можно аппроксимировать прямыми линиями (рисунок).



Слева: средние показатели преломления $n_{\text{ср1}}$, рассчитанные по методу молекулярных рефракций [3]; показатели преломления n_o , n_e , $n_{\text{ср2}}$ и величины ρ_{\parallel} , ρ_{\perp} , рассчитанные по WinOptAct [4]. Справа: зависимости $n_{\text{ср1}}$ (●), $n_{\text{ср2}}$ (■) и ρ_{\parallel} (▲) от параметра ячейки a .

1. Милль Б.В., Бутагин А.В., Ходжабагян Г.Г. и др. // ДАН СССР. 1982. Т. 264. С. 1385.
2. Дудка А.П., Милль Б.В. // Кристаллография. 2014. Т. 59. № 5. С. 759.
3. Бацанов С.С. Структурная рефрактометрия. М.: Высшая школа, 1976. 304 с.
4. Glazer A.M. // J. Appl. Cryst. 2002. V. 35. P. 652.
5. Константинова А.Ф., Гречушников Б.Н., Бокуть Б.В., Валяшко Е.Г. Оптические свойства кристаллов. Минск: Наука и техника, 1995. 302 с.

ПОЛУЧЕНИЕ КОМПОЗИТА ИЗ АЭРОГЕЛЯ НА ОСНОВЕ АМОРФНОГО ДИОКСИДА КРЕМНИЯ С ВКЛЮЧЕНИЯМИ ДЕТОНАЦИОННЫХ НАНОАЛМАЗОВ

Короткова М.А.¹, Ефимченко В.С.¹, Антонов В. Е.¹, Фурсова Т.Н.¹, Гавриличева К.А.¹, Баркалов О.И.¹, Лермонтов С.А.²

¹*Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия, adm@issp.ac.ru*

²*Институт физиологически активных веществ РАН, Черноголовка, Россия, ipac@ipac.ac.ru*

Для детонационных наноалмазов характерна высокая концентрация азотозамещенных вакансий, что представляет значительный интерес для квантовых технологий (например, для генерации одиночных фотонов) [1]. За последние годы было предложено множество различных способов получения наноалмазов [2], но их производство в промышленных масштабах пока остается за детонационным синтезом. В детонационных наноалмазах возможно наблюдение и контроль центров окраски азот-вакансия [3], однако для практического применения необходимо решить две проблемы: исключить их агрегацию и избавиться от графитоподобной фазы в их структуре.

Для исключения агрегации наноалмазов в Институте физиологически активных веществ РАН было предложено помещать одиночные алмазные наночастицы в оптически прозрачное твердое вещество – аэрогель на основе диоксида кремния. Практическому использованию препятствуют гидрофильность и хрупкость аэрогеля [4]. Как было показано нами ранее, эти недостатки могут быть устранены предварительным отжигом и обработкой при высоком давлении и температуре.

Мы также показали, что удалить графитоподобные оболочки одиночных детонационных наноалмазов, помещенных в аэрогель, можно путем обработки в атмосфере сжатого водорода при высоком давлении и температуре. Предположительно, продиффундировавший сквозь аэрогель водород разрушает sp^2 -углерод детонационных наноалмазов, образуя метан и/или другие летучие углеводороды.

Проводившиеся нами ранее обработки при высоких давлениях и температурах приводили к кристаллизации аморфного аэрогеля в коэсит или кварц, что сопровождалось значительным уменьшением его оптической прозрачности. Целью нынешней работы было изучение возможности получения прочного композита из одиночных детонационных наноалмазов в прозрачной матрице аморфного диоксида кремния.

Литература

1. Bolshedvorskii, S.V., Vorobyov, V.V., Soshenko, V.V. et al. Single bright NV centers in aggregates of detonation nanodiamonds. *Opt. Mater. Express* 7, 4038–4049 (2017).
2. Wu, Y., Weil, T., Recent Developments of Nanodiamond Quantum Sensors for Biological Applications. *Adv. Sci.* 9, 2200059 (2022).
3. Bradac, C., Gaebel, T., Naidoo, N. et al. Observation and control of blinking nitrogen-vacancy centres in discrete nanodiamonds. *Nature Nanotech* 5, 345–349 (2010).
4. Ярославцев, А.Б. Наноматериалы: свойства и перспективные приложения. Издательство: Научный мир. 2014.

LIGHT ABSORPTION BY FREE CARRIERS WITH SCATTERING MECHANISMS IN SEMICONDUCTOR SUPERLATTICE

Ibragimov G. B., Ibaeva R. Z.

Ministry of Science and Education, Baku, Azerbaijan, AZ 1143, G.Cavid ave., 131
e-mail: guseyn_gb@mail.ru , raidaibayeva1@gmail.com

The study of the electronic states of low-dimensional semiconductor superstructures and their control through the spectrum of the electron makes it possible to conduct theoretical and experimental studies of the optical and electrical properties of these structures in an external magnetic field. Such studies include the study of the effect of an external magnetic field on radiation absorption, high-frequency conductivity, static conductivity, volt-ampere characteristics, etc. It is known from the literature that an external magnetic field applied to semiconductor superlattices can significantly change its electronic spectrum. Many nonlinear effects occurring in semiconductor superlattices are related to the complex dynamics of the charge carriers of the superlattices.

For a long time, intra-band absorption has been studied in various nanostructures taking into account the electron-phonon interaction. In this study, the absorption of light by free charge carriers was studied taking into account the electron-phonon interaction in the semiconductor superlattices in the magnetic field.

When the magnetic field is oriented perpendicular to the surface of the superlattice, Landau quantization occurs and the energy is separated into discrete levels. At the same time, minibands resulting from the movement of electrons and holes in the z direction remain continuous.

When calculating the matrix elements of the Hamiltonian operator, which describes the interaction with the high-frequency field in the magnetic field, the high-frequency field is considered homogeneous. The expression of the square of the HR matrix element can be written as follows :

$$\left| \langle nk_x k_z | H_R | n'k'_x k'_z \rangle \right|^2 = \left(\frac{2\pi\hbar n_0}{\epsilon(\omega)\omega} \right) \left(e \frac{\Delta}{2} d \sin(k_z d) / 2\hbar \right)^2 \delta_{m'm} \delta_{k_x k'_x} \delta_{k_z k'_z} \quad (1)$$

ϵ is the dielectric constant, ω and c are the frequency and speed of the light wave.

Due to the quantum mechanical transition probability, while charge carriers scatter on phonons, charge carriers either absorb photons or emit photons, in this case, the light absorption coefficient with free charge carriers is calculated as follows :

$$\alpha = \frac{\epsilon^{1/2}}{n_0 c} \sum_i W_i f_i \quad (2)$$

Here n_0 is the number of photons in the radiation field, f_i is the distribution function of free charge carriers, W_i is the transition probability determined

Thus, when the magnetic field is directed perpendicular to the surface of the semiconductor superlattice, in the framework of the second-order excitation theory, in the case of scattering from polar and non-polar phonons, with free charge carriers the oscillation of absorption coefficient of light depending on both the intensity of the magnetic field and the frequency of the incident light and $N\omega_c = \Omega + \omega_0$ resonance condition were determined.

КОМПОЗИЦИОННАЯ КЕРАМИКА НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ: МЕХАНИЧЕСКИЕ И ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Дмитриевский А. А.¹, Ефремова Н. Ю.¹, Васюков В. М.¹,
Григорьев Г. В., Работягова Д. И.

¹Тамбовский государственный университет имени Г.Р. Державина, Тамбов, Россия,
E-mail: aadmitr@yandex.ru

Циркониевая керамика, упрочненная оксидом алюминия, (ATZ керамика), благодаря сочетанию лучших свойств компонентов, обладает улучшенными (по сравнению с ZrO_2) механическими свойствами (высокими значениями твердости, вязкости разрушения и износостойкости). Благодаря свойствам, достигаемым при комбинировании ZrO_2 и Al_2O_3 , ATZ керамика имеет широкий спектр приложений, включая сенсоры, термобарьерные покрытия, имплантаты, конструкционные изделия и многое другое. Введение специальных добавок обеспечивает дополнительное улучшение одних механических характеристик, но, как правило, сопряжено с ухудшением других. Например, добавление SiO_2 к ATZ керамике сопровождается увеличением вязкости разрушения (на 75 %) и прочности на сжатие (на 12 %), а также появлением запаса пластичности (неупругой деформации) при комнатных температурах. Однако, при этом уменьшается микротвердость (на 15 %) [1,2]. В связи с этим, цель исследований заключалась в разработке двухслойной ATZ керамики (содержащей и не содержащей SiO_2) и комплексной диагностике ее механических и трибологических свойств.

С учетом индивидуальных свойств ATZ и ATZ+ SiO_2 керамик, а также стремления к разработке керамики с одновременно высокими значениями твердости, прочности, износостойкости и обладающей повышенной деформируемостью, была изготовлена ATZ+ SiO_2 керамика с тонким (~ 100 мкм) приповерхностным слоем, не содержащим диоксид кремния. Благодаря наличию SiO_2 (4 мол.%) в основном объеме материала, образцы ATZ/ATZ+ SiO_2 не только обладают повышенным пределом прочности (на 10 % по сравнению с ATZ керамикой), но и демонстрируют отклонение от упругой деформации при одноосном сжатии (в условиях комнатных температур), что обеспечивает повышенное значение предельной деформации (на 25 % по сравнению с ATZ керамикой). Показано, что наличие приповерхностного слоя, не содержащего SiO_2 , обеспечивает не только повышенное значение микротвердости, но и снижение интенсивности изнашивания в условиях трения статического контртела (шарик из Al_2O_3) по движущемуся образцу (на 15 % и 30 % соответственно, по сравнению с ATZ+ SiO_2 керамикой). Коэффициент трения при этом одинаков (в пределах погрешности измерений) для ATZ и ATZ+ SiO_2 керамик ($\mu = 0,70 \pm 0,04$). Таким образом, разработана и изготовлена двухслойная композиционная керамика на основе ZrO_2 , обладающая комплексно улучшенными показателями механических и трибологических свойств.

Работа выполнена с использованием оснащения центра коллективного пользования научным оборудованием ТГУ имени Г.Р. Державина

Литература

1. Dmitrievskii A.A., Zhigachev A.O., Zhigacheva D.G., Rodaev V.V. // Tech. Phys. – 2020. – V. 65. – № 12. – P. 2016–2025.
2. Dmitrievskiy A.A., Zhigacheva D.G., Vasyukov V.M., Ovchinnikov P.N. // J. Phys. Conf. Ser. – 2021. – V. 2103. – P. 012075.

**НИЗКОРАЗМЕРНЫЙ ОРГАНИЧЕСКИЙ ПРОВОДНИК
κ-(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Cl₂ – БЕСПОРЯДОК В СТРУКТУРЕ И ЕГО
ВЛИЯНИЕ НА ПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА**

Хасанова Э.И.*, Кузьмин А.В.

*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук
(ИФТТ РАН)*

e-mail: hasanova.leo@issp.ac.ru

Металлическая проводимость в низкоразмерных органических кристаллах на основе плоских π-сопряженных молекул **BEDT-TTF** (или **ET**) реализуется за счет их особой кристаллической структуры: слоистой укладки донорных молекул [1] с относительно большим перекрыванием фронтальных молекулярных орбиталей (МО). Среди представителей широкого класса **ET**-проводников соль **κ-(BEDT-TTF)₂Cu[N(CN)₂]Cl₂** выделяется своими нетривиальными физико-химическими свойствами [2]. Можно отметить скачкообразное изменение сопротивления кристаллов **κ-Cl** в зависимости от приложенного напряжения, что позволяет говорить о возможности создания логических элементов на их основе [3]. Согласно литературным данным, проводящие свойства соли **κ-Cl** сильно зависят от деталей внутренней структуры катионных и анионных слоев. Существует ряд работ, предполагающих связь проводимости со структурным беспорядком в этиленовых группах молекул **ET** [3].

В данной работе методом РСА были исследованы особенности температурного поведения беспорядка в этиленовых группах **ET** молекул в кристаллах **κ-Cl** в интервале температур **100 К-300 К**. Исходя из полученных данных были построены кривые температурного поведения параметров и объема элементарной ячейки. Анализ температурных зависимостей позволил обнаружить особенность в области **180 К-240 К**, связанную с скачкообразным изменением коэффициента термического расширения. Детальный кристаллохимический анализ структурных данных позволил установить температурное поведение беспорядка в концевых этиленовых группах **ET** молекул. Температурные зависимости параметра заселенностей этиленовых групп указывают на то, что возможное полное упорядочение в структуре катионного слоя достигается в интервале **44 – 64 К**, при этом, в области **180 К-240 К** на графиках заселенностей наблюдается такая же особенность, как и на графиках параметров ячейки.

На основе полученных структур методами квантово-химического моделирования, с использованием полуэмпирического расширенного метода Хюккеля, было проанализировано, как структура электронных состояний в катионном слое соединения зависит от беспорядка данного типа. В частности, результаты расчетов позволили установить, как плотность состояний, энергия Ферми и зарядовое распределение внутри димеров меняется при перераспределении заселенностей концевых групп.

Литература

1. Прохорова Т.Г., Ягубский Э.Б. // Успехи химии. - 2017. - Т. 86, № 2. - С. 164-180.
2. Yagubskii E.B., Kushch N.D., Kazakova A.V., Buravov L.I., Zverev V.N. Manakov A.I., Khasanov S.S., Shibaeva R.P. // JETP Letter. - 2005. - V. 82. - № 2. - P. 93-95.
3. Huang Y., Hu Y., Ren S. // Applied Materials Today. - 2022. - V. 29. - P. 101569.

СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ПЛЕНОК НАНОКОМПОЗИТОВ ПОЛИ-*n*-КСИЛИЛЕН – СУЛЬФИД КАДМИЯ

Иванова О. П.¹, Кривандин А. В.¹, Пирязев А. А.², Завьялов С. А.³

¹Институт биохимической физики им.Н.М.Эмануэля РАН, Москва, Россия
olga@deom.chph.ras.ru

²Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия

³Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

При создании новых функциональных материалов с заданными свойствами особый интерес проявляется к плёночным полимерным наноккомпозитам с неорганическими включениями в виде полупроводниковых наночастиц. В качестве полимерной матрицы, стабилизирующей наночастицы, широко используется поли-*n*-ксилилен (ППК), а в качестве наночастиц - сульфид кадмия (CdS), обладающие высокой чувствительностью к воздействию света видимого диапазона. В связи с этим необходимы исследования физико-химических свойств этих наноккомпозитов, установление их связи со структурой и технологией синтеза.

Проведены исследования структуры наноккомпозитных пленок на основе поли-*n*-ксилилена (ППК) и сульфида кадмия (CdS) методом рентгеновской дифракции на рентгеновских дифрактометрах (ИБХФ РАН) и на синхротронном дифрактометре (линия BM26 ESRF, Гренобль, Франция). Пленки были синтезированы на кремниевых подложках, охлаждаемых до температуры жидкого азота, методом совместного осаждения из газовой фазы паров мономера *n*-ксилилена и CdS, имели толщину ~1.5 мкм и содержали от 5 до 90 об.% CdS. Методом ИК-спектроскопии в области 4000-600 см⁻¹ было подтверждено отсутствие в пленках других химических соединений помимо ППК и CdS. Результаты рентгенодифракционного исследования показали, что при увеличении содержания CdS в пленках происходили изменения структуры как полимерной матрицы, так и наполнителя. При содержании 5 об.% CdS полимерная матрица имела неориентированную аморфно-кристаллическую структуру, а при 10–70 об.% CdS – рентгеноаморфную структуру с преимущественной ориентацией при 30–70 об.% CdS. При 80 и 90 об.% CdS дифракционная картина от ППК не наблюдалась. Присутствие CdS в пленках не было выявлено методом рентгеновской дифракции при его содержании ≤ 50 об.%, что говорит о молекулярно-дисперсной или очень мелкокластерной форме CdS в этих пленках. В пленках, содержащих 60-80 об.% CdS, наблюдалась неориентированная рентгеноаморфная структура CdS с размером наночастиц, не превышающим ~3 нм. При содержании наполнителя ~ 90 об.% CdS, в пленке сформировались ориентированные наночастицы CdS с дефектной кристаллической структурой (СПУ-структура, характерная для CdS в наносостоянии [1]), имеющие размер ~9 нм. Проведенные исследования показали, что с ростом содержания наполнителя в исследуемых пленках ППК-CdS толщиной ~ 1.5 мкм наблюдаются увеличение размера наночастиц, приводящее к структурным изменениям, и появление ориентации в CdS и ППК.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИБХФ РАН (№ 01201253304)

Литература

1. Кожевникова Н.С., Ворох А.С., Урицкая А.А. // Успехи Химии. – 2015. – Т. 84. – № 3. – С. 225-250.

**СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА, ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ И СТРУКТУРА
НАНОКОМПОЗИТОВ ПОЛИ-*n*-КСИЛИЛЕН – СУЛЬФИД КАДМИЯ****Иванова О. П.¹, Кривандин А. В.¹, Пирязев А. А.², Завьялов С. А.³**¹*Институт биохимической физики им.Н.М.Эмануэля РАН, Москва, Россия, olga@deom.chph.ras.ru*²*Институт проблем химической физики РАН, Московская область, Черноголовка, Россия*³*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия*

Исследованиям физико-химических свойств композитных материалов и их синтезу в настоящее время уделяется особое внимание, благодаря их возможности сочетания различных функциональных свойств в одном материале. Большой интерес вызывают композитные материалы с полупроводниковыми включениями, иммобилизованными в различных полимерных матрицах. Если в таких системах характерные размеры частиц наполнителя уменьшаются до нанометровых, то важными становятся размерные эффекты, которые изменяют свойства нанокompозита. Таким образом, использование наноструктурирования может стать одним из ключевых подходов при разработке и создании новых материалов с заданными свойствами.

Предметом настоящих исследований послужили пленки ППК-CdS толщиной ~ 0.2 мкм с содержанием наполнителя CdS ($C \sim 0-100$ об. %). Пленки были синтезированы методом газофазной полимеризации на поверхности (ГПП-метод) путем совместного осаждения в вакууме паров мономера *n*-ксилилена и CdS на полированные кварцевые подложки, охлаждаемые до температуры жидкого азота. В зависимости от содержания наполнителя при комнатной температуре проведены исследования спектральных (оптические и ИК-спектры поглощения), фотоэлектрических (темновая и фотопроводимость) и структурных свойств нанокompозитов ППК-CdS.

Показано, что в пленках ППК-CdS при $C \geq 10.5$ об.% CdS наблюдаются изменения свойств, которые имели максимальные значения при $C_0 \sim 11$ об.% CdS. Так в исследуемых пленках с ростом содержания наполнителя обнаружены немонотонные сдвиги спектров оптического поглощения в длинноволновую область с максимумом при $C_0 \sim 11$ об.% CdS, увеличение проводимости (темновой и фото) примерно на два порядка по сравнению с пленкой чистого CdS в узком диапазоне концентраций $C \sim 10.5 - 11$ об.% CdS с максимальными значениями при $C_0 \sim 11$ об.%. При содержании наполнителя $C < 10.5$ об.% CdS методом ИК-спектроскопии в области $4000-600$ см⁻¹ обнаружено появление дополнительных полос, обусловленных образованием сложных соединений, содержащих сульфо- (SO₄) и карбоксилатные (COO⁻) группы, которые отсутствуют в ИК-спектрах при $C \geq 10.5$ об.%. Методами рентгеновской дифракции выявлены изменения структуры наполнителя CdS –от неориентированной рентгеноаморфной при $C < 10.5$ об.%, до ориентированной кристаллической структуры вюрцита при $C_0 \geq 11$ об.%, а также ППК - от неориентированной рентгеноаморфной до полного исчезновения на дифрактограммах пика ППК. Полученные результаты свидетельствуют о корреляции структурных изменений со спектральными и фотоэлектрическими свойствами нанокompозитов ППК-CdS толщиной ~ 0.2 мкм.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИБХФ РАН (№ 01201253304)

ДИНАМИКА ИСПАРЕНИЯ СОЕДИНЕНИЙ МОНОАТОМНЫХ СПИРТОВ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ПРЕДЕЛЬНЫЙ УГЛЕВОДОРОД - ВОДА ПО ДАН- НЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ РЕФЛЕКТОМЕТРИИ

Волков Ю. О.^{1,2}, Тихонов А. М.^{2,3}

¹ФНИИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

² Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка, Россия

³ Институт физических проблем РАН, Москва, Россия

e-mail: volkov.y@crys.ras.ru

Адсорбционную плёнку поверхностно-активного вещества на межфазной границе жидкость — жидкость можно рассматривать как квазидвумерную термодинамическую систему с параметрами (p , T , c) [1]. В частности, при изменении температуры T в адсорбционном слое происходит фазовый переход поверхностного испарения/замерзания, критическая температура которого T_c определяется концентрацией ПАВ c в объёмной фазе [2,3]. Примером такой системы является слой одноатомных спиртов (алканолов) на границе предельный углеводород — вода.

Методом рентгеновской рефлектометрии на синхротронном источнике исследована структура адсорбционного слоя додеканола $C_{12}H_{25}OH$ и тетракосанола $C_{24}H_{49}OH$ на границах раздела н-гексан (C_6H_{14}) / вода и н-гексадекан ($C_{16}H_{34}$) / вода в области температурного фазового перехода испарения. Объёмная концентрация ПАВ в углеводороде составила $c \approx 5$ ммоль/л, что превышает характерную концентрацию мицеллообразования, но недостаточно для формирования трёхкомпонентной эмульсии [4]. Измерения угловых зависимостей коэффициента отражения R были проведены на станции X19C синхротрона NSLS [5] на энергии излучения 15 кэВ (длина волны $\lambda = 0.825 \pm 0.002$ Å) при интенсивности $\sim 10^{10}$ ф/с. Реконструкция распределений объёмной электронной плотности по глубине на интерфейсах была проведена в рамках модельно-независимого подхода [6].

На полученных поперечных профилях плотности показаны качественные изменения в тонкой структуре адсорбционного слоя при различных соотношениях длин молекулярных цепей растворитель-ПАВ. В частности, при уменьшении длины молекулы спирта наблюдается переход от Гиббсовского монослоя к многослойной адсорбции. Предположительно, это обусловлено тем, что при соотношении длин алканольных цепей спирта и растворителя в пределах 6-8 субъединиц происходит относительное понижение удельной поверхностной энтропии, изменяющее эффективный механизм адсорбции от фазовой системы вида «газ-жидкость» к системе вида «газ — твёрдая подложка».

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект №23-12-0020).

Литература

1. Kaganer V.M., Möhwald H. and Dutta P. // Rev. Mod. Phys. - 1999 - V. 71 - P. 779.
2. Takiue T., Yanata A., Ikeda N., Motomura K., and Aratono M. // J. Phys. Chem. - 1996 - V. 100 — P. 13743.
3. Тихонов А.М. // Письма в ЖЭТФ - 2017 - Т. 105, вып. 11-12 - С. 737-743.
4. Flores M.V., Voutsas E.C., Spiliotis N., Eccleston G.M., Bell G., Tassios D.P., and Halling P.J. // J. Coll. Interf. Sci. - 2001 - V. 240 - P. 277.
5. Schlossman M.L., Synal D., Guan Y., Meron M., Shea-McCarthy G., Huang Z., Acero A., Williams S.M., Rice S.A., and Viccaro P.J. // Rev. Sci. Instrum. - 1997 - V. 68 - P. 4372.
6. Kozhevnikov I.V., Peverini L., and Ziegler E. // Phys. Rev. B - 2012 - V. 85 - P. 125439.

МАГНИТНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПРИ ДАВЛЕНИИ В BaMn_2P_2 И BaMn_2As_2 : GGA+U

Павлов Н. С.^{1,2}, Шейн И. Р.³, Некрасов И. А.^{1,2}

¹Институт электрофизики УрО РАН, Екатеринбург, Россия, pavlovns@gmail.com

²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

³Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия, shein@ihim.uran.ru

Изучение высокотемпературных сверхпроводников на основе пниктидов и халькогенидов железа [1,2,3] породило поиск новых химических или структурных аналогов и совершенно новых соединений данного класса (см. например [4,5]). Одной из задач поиска аналогов данных систем является изучение возможности полного замещения Fe другими химическими элементами, например, марганцем Mn. В связи с тем, что у Mn наполовину заполнена 3d оболочка, он является сильным магнитным ионом. При приложении внешнего давления магнетизм подавляется. В таком случае появляется возможность реализации сверхпроводимости. В работе [6] для BaMn_2As_2 , изоструктурного аналога системы BaFe_2As_2 , при приложении внешнего давления выше 5.8 ГПа происходит переход в металлическое состояние и резкое понижение сопротивления при температуре ниже 17 К. К настоящему моменту, возможность наблюдения сверхпроводимости в BaMn_2As_2 детально не изучалась. Также изоструктурное соединение с фосфором BaMn_2P_2 под давлением теоретически и экспериментально не изучалось.

В данной работе в рамках теории функционала электронной плотности DFT проведено изучение BaMn_2P_2 и BaMn_2As_2 при различном внешнем давлении. Расчеты были произведены в приближении GGA+U в программном пакете VASP. Построена зависимость величин параметров решетки, величины энергетической щели, магнитных моментов от внешнего давления. Обнаружены следующие фазы и фазовые переходы:

1. При нормальном давлении и $T = 0$ К исследуемые соединения являются диэлектриками с антиферромагнитным упорядочением.
2. При $P = 4.8$ ГПа для BaMn_2P_2 и $P = 12$ ГПа для BaMn_2As_2 происходит переход в металлическую фазу с антиферромагнитным упорядочением.
3. При $P = 33$ ГПа для BaMn_2P_2 и $P = 76$ ГПа для BaMn_2As_2 осуществляется переход в ферромагнитную металлическую фазу.
4. При $P = 41$ ГПа для BaMn_2P_2 и $P = 101$ ГПа для BaMn_2As_2 данные соединения испытывают фазовый переход из ферромагнитного металла в немагнитный металл (локальные магнитные моменты на атомах исчезают). Тем самым выше данных давлений в системах BaMn_2P_2 и BaMn_2As_2 теоретически может реализоваться сверхпроводящее состояние.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФ (грант №21-12-00394).

Литература

1. M.V. Sadovskii // Phys. Usp. – 2008. – V. 51. – P. 1201.
2. G.R. Stewart // Rev. Mod. Phys. – 2011. – V. 83. – P. 1589.
3. M.V. Sadovskii // Phys. Usp. – 2016. – V. 59. – P. 947.
4. M. Neupane, C. Liu, S.-Y. Xu, et al. // Phys. Rev. B. – 2012. – V. 85. – P. 094510.
5. I.A. Nekrasov, M.V. Sadovskii // JETP Lett. – 2014. – V. 99. – P. 598.
6. A.T. Satya, A. Mani, A. Arulraj, et al. // Phys. Rev. B. – 2011. – V. 84. – P. 180515.

ВЛИЯНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА ПИННИНГА НА ПЕРЕМЕЩЕНИЕ ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ В ВЧ ПОЛЕ

М.В. Никитин, С.Г. Зыбцев, В.Я. Покровский

ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН, Москва, Россия, vadim.pokrovskiy@mail.ru

Хорошо известно, что скольжение волны зарядовой плотности (ВЗП) в электрическом поле можно описать как движение частицы в периодическом потенциале пиннинга (ППП), период которого равен периоду ВЗП λ . Воздействие ППП приводит к генерации узкополосного шума, а при наложении ВЧ поля – к появлению ступенек Шапиро (СШ) на ВАХ (синхронизации скольжения ВЗП).

В [1] было экспериментально показано, что в режиме синхронизации перемещение ВЗП можно описать как асимметричные колебания ВЗП в ППП. При этом, если точно известно значение ВЧ напряжения V_{rf} , можно определить мгновенную скорость ВЗП как функцию времени и рассчитать перемещение ВЗП на масштабах времён порядка $1/f$, где f частота ВЧ поля. Например, максимум первой СШ наблюдается, если за первый полупериод ВЧ поля, $t=1/2f$, ВЗП смещается вперёд на 1.5λ , а за последующий – возвращается на 0.5λ . В результате, за время $t=1/f$ ВЗП проделывает *путь* $S=2\lambda$. Примечательно, что, хотя возникновение СШ однозначно связано с ППП, воздействие ППП на движение ВЗП в расчёте не учитывалось.

С помощью низкочастотного синхронного детектора (СД) нами были записаны зависимости дифференциальной проводимости, σ_d , от напряжения V . При этом СШ видны как минимумы σ_d (рис.1а). *Перемещение* ВЗП в области n -й СШ за время $1/f$ равно $n\lambda$. Расчёт ВАХ без учёта ППП дал ожидаемый результат: при V ниже середины СШ *перемещение* ВЗП занижается, при V выше середины СШ – завышается [2].

Одновременно с $\sigma_d(V)$ мы записали показания другого, ВЧ синхронного детектора. В качестве опорного сигнала использовалось ВЧ напряжение. Измеренный ток (за вычетом линейного вклада) несложно пересчитать в *путь* ВЗП за время $1/f$. Оказалось, что полученный результат в области СШ также отклоняется от расчётного. Так, в центрах СШ *путь* ВЗП оказывается ниже расчётного (рис.1б), что также можно объяснить влиянием ППП.

Работа выполнена при поддержке РФФ, проект 22-12-00319.

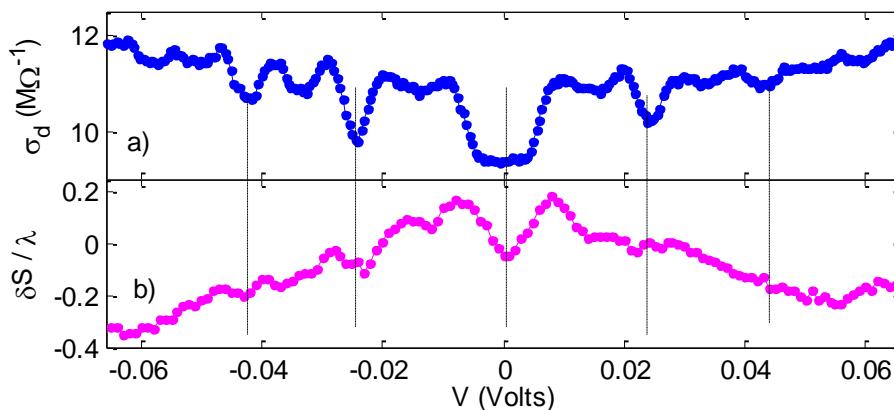


Рис. 1. а) $\sigma_d(V)$ образца TaS₃ при воздействии ВЧ поля, $f=400$ кГц, $V_{rf}=27.7$ мВ. б) Показания ВЧ СД на частоте f , измеренный одновременно. Показания пересчитаны в *путь* S за время $1/f$, и из величины S вычтено расчётное значение. Результат приведён в единицах λ . $T=120$ К.

Литература

1. Zybtev S.G. et al. // Phys. Rev. B. – 2020. – V. 101. P. – 115425.
2. Nikonov S.A. et al. // Appl. Phys. Lett. – 2021. – V. 118. P. – 213106.

СТРУКТУРА МАГНИТНОГО ПОТОКА В МОНОКРИСТАЛЛАХ $\text{EuFe}_2\text{As}_2/\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$

Сидельников М.С.¹, Успенская Л.С.¹, Пальниченко А.В.¹, Зверькова И.В.¹,
Перваков К.С.², Власенко В.А.², Пудалов В.М.², Винников Л.Я.¹

¹ИФТТ РАН, Черногловка, Россия, m.sidelnikov@issp.ac.ru.

²ФИАН им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия.

Монокристаллы пниктидов, содержащие атомы с большим спиновым магнитным моментом, такие как Eu^{2+} , привлекают внимание обилием магнитных особенностей и касаются фундаментальных проблем физики конденсированного состояния [1]. В данной работе исследовалась структура магнитного потока в тонком монокристалле $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$, выращенном на поверхности монокристаллического EuFe_2As_2 . Использовались методики декорирования магнитными наночастицами [2], магнитооптической (МО) визуализации магнитного потока с помощью индикаторных пленок [3], а также индукционная магнитометрия. Температурная зависимость динамической магнитной восприимчивости $\chi'(T)$ обнаружила магнитные переходы при $T = 15$ К и 35 К, характерные для $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$, а также при $T = 21$ К, характерный для EuFe_2As_2 . Декорирование при $T = 8$ К в перпендикулярном магнитном поле $H = 20$ Э выявило вихри Абрикосова, локализованные вдоль кристаллографического направления [110] (Рис. 1а), что можно интерпретировать как пиннинг вихрей в $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$ на двойниковых границах несверхпроводящего EuFe_2As_2 . МО визуализация показала, что при $T < 33$ К появляется экранирование магнитного поля, однозначно свидетельствующее о возникновении сверхпроводимости, а при $T < 19$ К образец становится магнитно-упорядоченным, причем возникают пространственные вариации магнитной проницаемости, которые однозначно привязываются к двойниковой структуре EuFe_2As_2 (Рис. 1б - 1д).

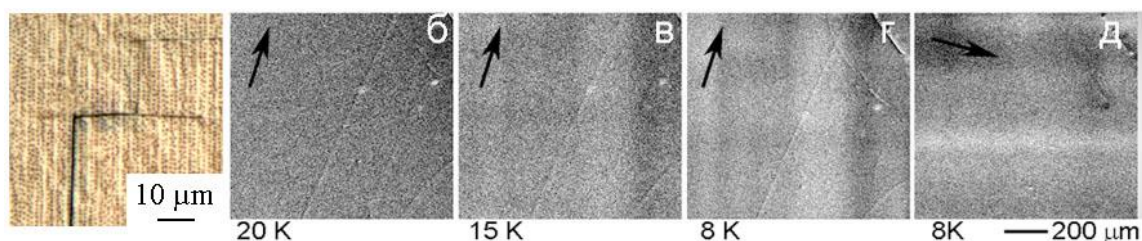


Рис. 1. (а) – вихревая структура в кристалле $\text{EuFe}_2\text{As}_2/\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$ при $T = 8$ К в перпендикулярном поле $H = 20$ Э, и (б-д) – МО наблюдение модуляции магнитной проницаемости в плоскости (001) при $T < 19$ К (стрелки показывают направление поля, температура наблюдения подписана под рисунками).

Литература

1. Zapf S., Dressel M. // Rep. Prog. Phys. – 2017. – V. 80 – P. 016501.
2. Винников Л.Я., Вещунов И.С., Сидельников М.С., Столяров В.С. // Приборы и техника эксперимента. – 2019. – №4. – С. 141-147.
3. Uspenskaya L.S., Tikhomirov O.A., Vozhko S.I., Egorov S.V., Chugunov A.A. // J. Appl. Phys. – 2013. – V.113. – P. 163907.
4. Винников Л.Я., Сидельников М.С., Нанofизика и нанoeлектроника, Труды XXII Международного симпозиума, Нижний Новгород, том 1, стр. 23 (2023).

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ СТРУКТУРНЫХ ДОМЕНОВ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ПНИКТИДОВ ЖЕЛЕЗА $\text{EuFe}_2\text{As}_2/\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$

Винников Л.Я.¹, Успенская Л.С.¹, Сидельников М.С.¹, Перваков К.С.², Власенко В.А.², Пудалов В.М.²

¹ *Институт Физики Твёрдого Тела РАН, Черноголовка, Россия, vinnik@issp.ac.ru*

² *ФИАН им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия*

Монокристаллы пниктидов щелочно-галлоидных и редкоземельных элементов представляют большой интерес ввиду разнообразия их магнитных и сверхпроводящих свойств [1]. Однако синтез и выращивание таких совершенных и однородных монокристаллов кристаллов представляет большие трудности [2]. В частности, при синтезе сверхпроводящих монокристаллов $\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$ “1144”, встречается примесь фазы EuFe_2As_2 ”122”), которая структурно является родительской фазой для 1144 [3]. В настоящей работе исследовались монокристаллы типа 1144, в которых доля фазы 122 была значительной [4]. Методом декорирования в этих кристаллах наблюдались особенности вихревой структуры [4], которые выглядели как пиннинг вихрей по границам двойников, однако известно [1], что двойникование характерно для несверхпроводящей фазы 122, а не для сверхпроводящей фазы 1144. В данной работе методом поляризационно-оптической микроскопии исследовалось двойникование в кристаллах и кинетика их трансформации с температурой в диапазоне от комнатной до 8 К, а также влияние внешнего магнитного поля на двойниковую структуру. Начальный этап формирования двойников показан на Рис. 1. Видно, что образование двойниковой структуры начинается вблизи 190 К, что хорошо согласуется с температурой структурного превращения фазы 122 из тетрагональной в орторомбическую [5], а плотность двойников резко увеличивается при понижении температуры на величину ~ 1 К. Следует отметить, что картина двойникования критическим образом зависит от условий охлаждения и магнитного поля.

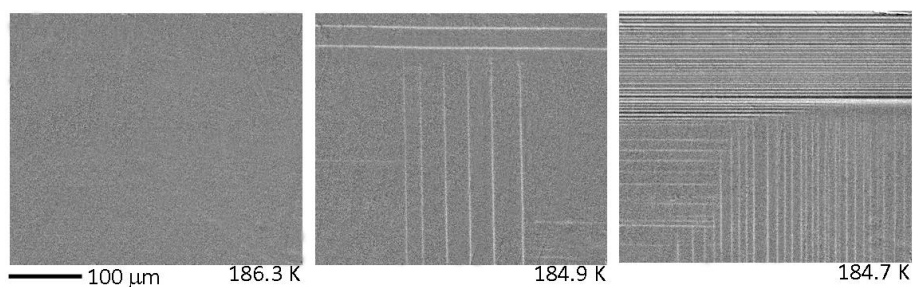


Рис. 1. Микрофотографии монокристалла $\text{EuFe}_2\text{As}_2/\text{EuRbFe}_4\text{As}_4$, полученные в поляризационно-оптическом микроскопе при охлаждении.

Литература

1. Tanatar M.A., Kressig A., Nandy S., et al. // *Phys. Rev. B* – 2009. – V. 79. – P. 180508.
2. Degtyarenko A.Yu., Karateev I.A., Ovcharov A.V., et al. // *Nanomaterials* – 2022. – V. 12. – P. 3801.
3. Ким Т.К., Перваков К.С., Власенко В.А. и др. // *УФН* – 2022. – Т.192 – №7. – С.790-798.
4. Винников Л.Я., Сидельников М.С., *Нанопизика и наноэлектроника, Труды XXII Международного симпозиума, Нижний Новгород, том 1, стр. 23 (2023).*
5. Xiao Y., Su Y., Meven M., et al. // *Phys. Rev. B* – 2009. – V. 80. – P.174424.

МУЛЬТИЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ МИКРОТОМОГРАФИЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ КРИСТАЛЛА-АНАЛИЗАТОРА

**Золотов Д.А.¹, Бузмаков А.В.¹, Григорьев М.В.², Дьячкова И.Г.¹,
Ингачева А.С.^{3,4}, Николаев Д.П.^{4,3}, Чукалина М.В.^{1,3}, Щелоков И.А.²,
Асадчиков В.Е.¹**

¹ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия, E-mail
zolotovden@crys.ras.ru

² ИПТМ РАН, Черноголовка, Россия

³ ООО «Смарт Энджинс Сервис», Москва, Россия

⁴ ИППИ РАН, Москва, Россия

Рентгеновская томография является неразрушающим методом исследования пространственной структуры объектов различной природы. В его основе лежит математическая обработка рентгеновских проекций исследуемого объекта, полученных при его различных углах поворота, с целью реконструкции трехмерного изображения объекта. При томографическом исследовании контраст различных по структуре и составу областей образца зависит, в том числе, и от энергии зондирующего излучения. Анализируя дифференциальный томографический контраст на разных энергиях излучения, мы можем восстановить информацию об элементном составе объекта. Такой метод исследования называется рентгеновской мультиэнергетической (спектральной) томографии.

В работе предложена экспериментальная схема спектральной микротомографии, отличная от традиционно используемой в томографах, а именно, - между объектом и детектором добавлен дисперсионный рентгенооптический элемент – кристалл-анализатор Si(111) в геометрии Лауэ. Таким образом, из падающего на исследуемый образец полихроматического излучения стандартной рентгеновской трубки выбираются характеристические длины волн для получения проекционных изображений [1]. Данная схема дает возможность разделить изображения, формируемые разными энергетическими компонентами зондирующего рентгеновского излучения, что позволяет повысить информативность томографических данных за счет более точной дифференциации различных структур объекта или химических элементов, входящих в их состав. В этом случае отсутствуют проблемы, связанные с изменением положения образца между сканированиями, а использование единого источника излучения решает проблему совмещения реконструкций для разных длин волн.

Однако, следует отметить, что в результате дифракции излучения от выбранных семейств отражающих плоскостей кристалла возникают искажения регистрируемых проекционных изображений. Для их коррекции разработан алгоритм определения матрицы проективного преобразования с использованием базовой проекции, полученной в проходящем пучке [2].

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части проведения рентгеновских исследований и ИПТМ РАН (№ 075-01304-23-00) в части обработки томографических данных.

Литература

1. Zolotov D. et al. // Journal of Applied Crystallography. – 2020. – V. 53. – №. 3. – P. 781-788.
2. Buzmakov A. et al. // Sensors. – 2020. – V. 20. – №. 23. – P. 6970.

ТРАНСПОРТНЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА MN-CO-Fe-V-GA

**Кожухов А.А.¹, Середина М.А.¹, Карпенков Д.Ю.^{1,2}, Колесников Е.А.¹,
Ховайло В.В.^{1,3}**

¹*Национальный исследовательский технологический университет МИСИС, Москва,
Россия*

²*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

³*Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
Белгород, Россия*

E-mail: kozhukovv@yandex.ru

Полуметаллические скомпенсированные ферромагнетики сплавов Гейслера имеют высокие перспективы применения в сфере спинтроники, обладающей потенциалом для разработки более быстрых и энергоэффективных электронных устройств [1]. Это связано с тем, что спином электрона можно управлять гораздо быстрее, чем его зарядом, и использование спина в электронике потенциально может обеспечить более эффективную обработку и хранение данных [2].

Тонкие пленки системы сплавов Гейслера Mn-Co-Fe-V-Ga были получены методом магнетронного распыления с использованием двух подложек: стекло и монокристаллический сапфир (параметры процесса: P = 200 Вт, τ = 10 мин, l = 2,5 см). Предварительно была синтезирована мишень заданного состава методом искрового плазменного спекания в вакууме (давление 40 Мпа, температура 1073 К, продолжительность 15 минут), рентгенофазовый анализ мишени показал наличие фазы Гейслера с параметром решетки 0,5844 нм. Состав мишени выбирался с учетом количества валентных электронов. Точный химсостав и толщина полученных пленок были Mn_{1,39}Co_{0,59}Fe_{0,51}V_{0,49}Ga_{1,02} и 725 нм, а также Mn_{1,32}Co_{0,64}Fe_{0,38}V_{0,48}Ga_{1,18} и 585 нм для пленок на сапфире и стекле соответственно. СЭМ-микроскопия подтвердила равномерное распределение элементов в образцах.

Удельное электросопротивление образцов имело полупроводниковый характер в температурном диапазоне от 80 до 350 К в отличие от недопированного железом сплава Mn-Co-V-Ga. Сопротивление достигало 5,69 мОм·см и 9,42 мОм·см при 80 К для пленок на сапфире и стекле соответственно. Удельное электросопротивление для пленок на сапфире с температурой изменялось слабее, слабая зависимость электросопротивления от температуры является одним из признаков полуметаллического поведения.

Исследование эффекта Холла образцов позволило выявить доминирующую роль в типе проводимости носителей заряда. Коэффициенты нормального эффекта Холла образцов имеют положительные значения, таким образом для пленок была установлена проводимость p-типа. Коэффициенты нормального эффекта Холла, концентрация носителей тока и холловская подвижность носителей имели порядки величин 10⁻² см³/Кл, 10²⁰ см⁻³ и 10¹ см²/(В·с) соответственно.

Полевые кривые намагниченности для пленок были схожи с зависимостями намагниченности материалов, в которых присутствует суперпарамагнетизм.

Литература

- 1 Simple rules for the understanding of Heusler compounds / T. Graf, Cl. Felser, S.P. Parkin e.a. // Progress in Solid State Chemistry. – 2011. – V. 13.
- 2 Palmstrom Chris J. Heusler compounds and spintronics // Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials. – 2016. – V. 62.

КОМПОЗИЦИОННЫЙ МАТЕРИАЛ С МАТРИЦЕЙ НА ОСНОВЕ КАРБИДА КРЕМНИЯ, АРМИРОВАННОГО ПРОВОЛОКОЙ ИЗ МОЛИБДЕНА

Каледин А.В., Шикунов С.Л., Курлов В.Н.

Институт физики твёрдого тела РАН, г. Черноголовка, Россия, kaledin@issp.ac.ru

Несмотря на высокую механическую и термоударную прочность, низкую плотность, теплофизические характеристики и стойкость к окислению SiC керамики её использование в высоконагруженных конструкциях ограничено из-за низкой трещиностойкости и хрупкого характера разрушения. Одним из путей решения этой проблемы является получение композитов с SiC матрицей, армированных непрерывными волокнами. Использование высокопластичных металлических волокон позволит изменить хрупкое поведение керамики в сторону псевдопластичного разрушения. Тугоплавкие волокна из Mo, обладающие высокой коррозионной стойкостью, низким КТР и высокой прочностью на разрыв, могут рассматриваться в качестве альтернативы используемым в настоящее время волокнам из C и SiC, особенно для приложений, где вес композита не является критическим фактором.

Для получения таких композитов был использован способ жидкофазного силицирования пористых углеродных матриц с внедрённой в них тугоплавкой проволокой [1]. Для создания композиционного материала с большой объёмной долей армирования многочисленными волокнами малого диаметра был разработан метод шликерного формования, в котором исходная смесь для получения углеродной заготовки имеет в основе жидкий полимер, обеспечивающий формирование матрицы в пространстве между армирующими элементами.

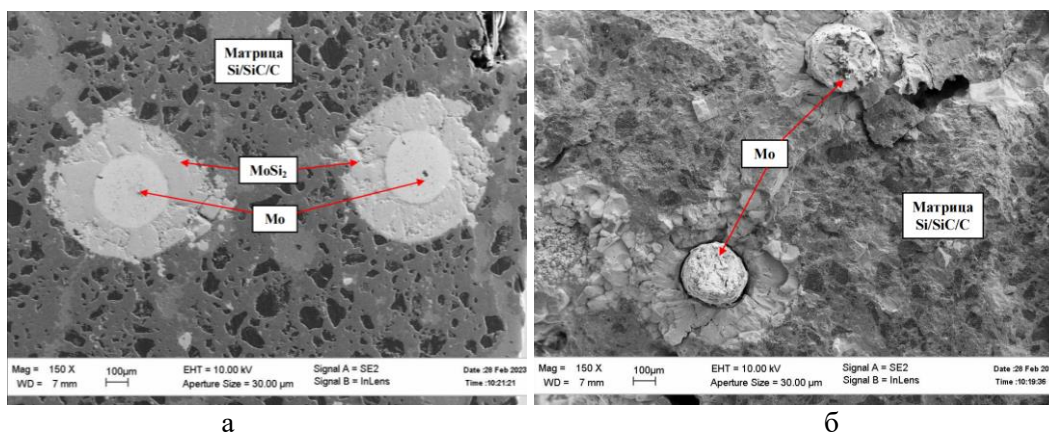


Рис.1. Микроструктура композита с матрицей на основе SiC, армированного Mo проволокой (а); поверхность разрушения образца после испытаний (б).

Были опробованы различные типы связующих для формирования матрицы. На основе разработанного способа были получены образцы металлокерамического композиционного материала с матрицей из SiC керамики, армированного тугоплавкой металлической проволокой малого диаметра, на поверхности которой в процессе пропитки и взаимодействия кремния с пористой углерод-металлической заготовкой формируется слой силицидов, обеспечивающий хорошую связь между матрицей и проволокой, Рис. 1. Была исследована микроструктура полученных образцов и проведены механические испытания, показавшие псевдопластичный характер разрушения композитов.

Список литературы.

1. Kaledin A., Shikunov S., Komarov K., Straumal B., Kurlov V. SiC-Based Composite Material Reinforced with Molybdenum Wire. *Metals*. **2023**, 13, 313.

СПИНОВЫЙ ТОК НА ГРАНИЦЕ МАНГАНИТНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР

Овсянников Г.А., Константилян К.И., Климов А.А., Ульев Г.Д., Шмаков В.А.,
Шадрин А.В.

*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, Москва,
Россия*

Использование спинового тока вместо зарядового открывает новые возможности в микроэлектронике из-за существенного уменьшения выделения тепла. Однако детектирование и генерация спинового тока требует совершенно иного подхода к проблеме спинового транспорта. В настоящей работе представлены результаты экспериментальных исследований параметров ферромагнитного резонанса и спинового магнитосопротивления границы $\text{SrIrO}_3/\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ и $\text{Pt}/\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$, которые определяют спиновый транспорт в гетероструктурах.

Тонкие эпитаксиальные пленки нанометровой толщины из иридата стронция SrIrO_3 (SIO) и манганита $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ (LSMO) были выращены на монокристаллической подложке $(110)\text{NdGaO}_3$ с помощью магнетронного распыления при температуре подложки $770\text{--}800^\circ\text{C}$ в смеси газов аргона (Ar) и кислорода O_2 с общим давлением 0.3 mBar .

В режиме ферромагнитного резонанса (ФМР) и взаимно перпендикулярных направленных СВЧ и постоянного полей поперек границы возникает “чисто” спиновый ток (нет переноса заряда). Величина спинового тока определяется амплитудой прецессии намагниченности ферромагнетика и спиновой проводимостью границы (spin mixing conductance), в общем случае имеющая действительную ($\text{Re } g^{\uparrow\downarrow}$) и мнимую ($\text{Im } g^{\uparrow\downarrow}$) части.

Спектр ФМР определялся из зависимости от магнитного поля амплитуды проходящего СВЧ излучения в интервале частот $F = 1\text{--}20\text{ GHz}$. Из обработке экспериментальных спектров ФМР определялись частотные зависимости резонансного поля $H_0(F)$ и ширины линии $\Delta H(F)$ [1,2]. Величина реальной части спиновой проводимости определяется из увеличения затухания Гильберта α после напыления SIO пленки поверх LSMO.

Экспериментальные данные показывают, что затухание для LSMO пленки $\alpha_{\text{LSMO}} = 2.0 \pm 0.2 \cdot 10^{-4}$ после напыления SIO увеличивается до значений $\alpha_{\text{SIO/LSMO}} = 6.7 \pm 0.8 \cdot 10^{-4}$. Величина реальной части спиновой проводимости определяется разностью этих значений $\text{Re } g^{\uparrow\downarrow} = (6.0 \pm 0.6) \cdot 10^{19}\text{ m}^{-2}$ [1].

Отношение спинового и зарядового токов определяется безразмерным параметром θ_{SH} – спиновым углом Холла, который можно определить из угловых зависимостей спинового магнитосопротивления в планарной геометрии. Для гетероструктуры SIO/LSMO из измерений поперечного магнитосопротивления спиновый угол Холла оказался существенно выше: $\theta_{\text{SH}} \approx 0.35 \pm 0.06$, чем $\theta_{\text{SH}} \approx 0.02$ для гетероструктуры Pt/LSMO

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-49-10006, <https://rscf.ru/project/23-49-10006/>.

1. Г. А. Овсянников и др. // Письма в ЖТФ, **48**, 44 (2022)
2. К.И. Константилян и др. Физика твердого тела . 64, 1429 (2022)
3. G.A. Ovsyannikov et al. Phys Rev. B (2023) to be published

КОРРЕЛЯЦИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ CeB_6 В ТЕМПЕРАТУРНОМ ДИАПАЗОНЕ 85–500 К

Хрыкина О. Н.^{1,2}, Гридчина В. М.¹, Богач А. В.², Азаревич А. Н.²,
Случанко Н. Е.², Болотина Н. Б.^{1,2}

¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

²Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия,
kvarkpower@gmail.com

Изменение физических свойств материалов под действием температуры следует за изменением атомного строения. В кристаллах CeB_6 , обладающих простой кубической структурой, обнаружены отклонения гальваномагнитных свойств от характерных для Кондо-решёток в области температур от 100–400 К [1].

В настоящей работе методом рентгеноструктурного анализа изучены особенности атомного строения монокристаллов CeB_6 в температурном диапазоне 85–500 К. Структура уточнена в пр. гр. $R\bar{3}m$. Величины R -факторов уточнения структурной модели не превышали 2%. Обнаружены особенности на температурной зависимости периода элементарной ячейки вблизи 170 и 370 К (рис. 1а).

Моделирование динамики атомов методом наименьших квадратов проведено с помощью программы DebyeFit [2] (рис. 1б). Наклон кривой $u_{\text{eq}}(T)$ определяет характеристические температуры Дебая (для подсистемы атомов бора) и Эйнштейна (для атомов церия). В области ниже 370 К экспериментальные данные для каждой из подсистем можно аппроксимировать с помощью кривой с другим наклоном, которая соответствует другой характеристической температуре, что может указывать на фазовый переход. Однако это не приводит к существенному улучшению факторов расходимости модели с экспериментальными данными. Вблизи 170 К немонотонность на зависимости $u_{\text{eq}}(T)$ не обнаружена.

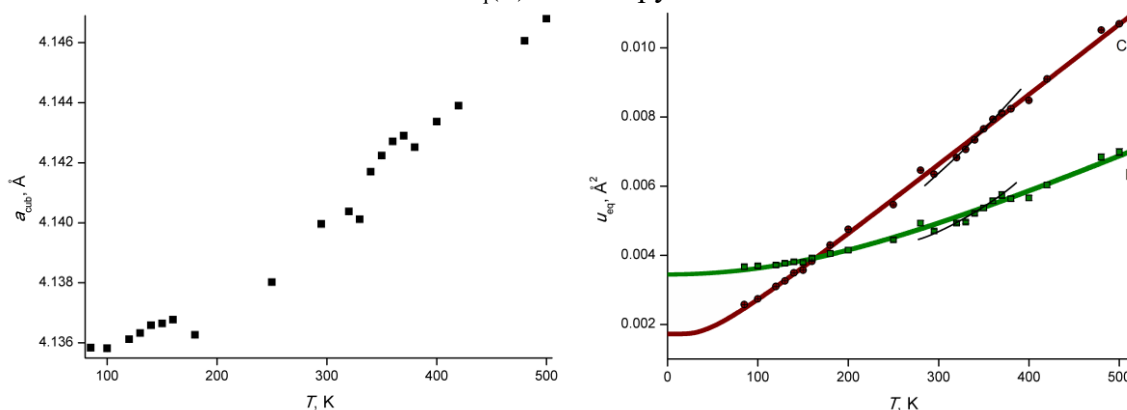


Рис. 1. Температурные зависимости а) периода решетки CeB_6 , б) эквивалентных параметров атомных смещений u_{eq} церия и бора.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-22-00297).

Литература

1. Случанко Н.Е., Богач А.В., Глушков В.В., Демишев С.В., Иванов В.Ю., Игнатов М.И., Кузнецов А.В., Самарин Н.А., Семенов А.В., Шицевалова Н.Ю. // ЖЭТФ. – 2007. – Т. 131. – № 1. – 133–154.
2. Dudka A.P., Bolotina N.B., Khrykina O.N. // J. Appl. Cryst. – 2019. – V. 52. – P. 690–692.

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ $Fe_{78}Si_{13}B_9$ С ЗАЩИТНЫМ ПОКРЫТИЕМ

Чиркова В.В., Волков Н.А., Першина Е.А., Абросимова Г.Е., Аронин А.С.
ИФТТ РАН, Черногловка, Россия, valyffkin@issp.ac.ru

Аморфные сплавы, получаемые скоростной закалкой расплава, характеризуются меньшей плотностью по сравнению с их кристаллическими аналогами. Области пониженной плотности или увеличенное пространство между атомами в аморфных сплавах называют свободным объемом [1]. Свободный объем может играть определяющую роль в процессах кристаллизации аморфных сплавов. В тех областях аморфных сплавов, где присутствует большее количество свободного объема, любые структурные перестройки будут облегчены [2]. Следовательно, увеличение количества свободного объема позволит ускорить процессы кристаллизации. Для увеличения свободного объема используют различные методы пластической деформации аморфных сплавов: холодная прокатка, кручение под высоким давлением и т.д. Одним из относительно новых способов деформации аморфных сплавов, который также приводит к увеличению количества свободного объема, является ультразвуковая обработка [3]. Однако количество свободного объема может уменьшаться при вылеживании аморфных сплавов или при их термической обработке. Уменьшение количества свободного объема происходит диффузионным путем через поверхность аморфных сплавов. Для проверки влияния свободного объема на кристаллизацию аморфных сплавов проведено исследование структуры исходных аморфных сплавов и сплавов после ультразвуковой обработки со специальным защитным покрытием из тантала. Защитное покрытие из тантала позволит предотвратить уменьшение свободного объема [4].

В качестве объектов исследования были выбраны аморфные сплавы состава $Fe_{78}Si_{12}B_9$. Эти сплавы характеризуются хорошими магнитными свойствами: высокой намагниченностью насыщения и низкой коэрцитивной силой. Для увеличения количества свободного объема аморфные сплавы подвергались ультразвуковой обработке. На исходные аморфные сплавы и сплавы после ультразвуковой обработки методом катодного распыления наносилось защитное покрытие, после чего исследуемые образцы подвергались изотермическому отжигу. Структура сплавов исследовалась методом рентгеноструктурного анализа и просвечивающей электронной микроскопией. Толщина покрытия оценивалась с помощью сканирующей электронной микроскопии.

Исследование показало, что ультразвуковая обработка аморфных сплавов действительно способствует увеличению количества свободного объема: в аморфных сплавах после ультразвуковой обработки доля кристаллической фазы больше по сравнению с образцами, не подвергавшимися этой обработке. Защитное покрытие позволяет сохранить свободный объем в исходных аморфных сплавах и в сплавах после ультразвуковой обработки, что способствует ускорению кристаллизации.

Работа выполнена в рамках госзадания ИФТТ РАН.

Литература

1. Cohen M.H., Turnbull D. // J. Chem. Phys. – 1959. – Vol. 31. – №5. – P. 1164.
2. Aronin A.S., Louzguine-Luzgin D.V. // Mech. Mater. – 2017. – Vol. 113. – P. 19.
3. Lou Y., Liu X., Yang X., Ge Y., Zhao D., Wang H., Zhang L.-C., Liu Z. // Intermetallics – 2020. – Vol. 118. – 106687.
4. Chen Z.Q., Huang L., Wang F., Huang P., Lu T.J., Xu K.W. // Mater. Des. – 2016. – Vol. 109. – P. 179.

ОТРИЦАТЕЛЬНОЕ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ В Cd₃As₂ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ.

Л.А. Сайпулаева¹, Бабушкин², А.В.Тебеньков², Н.В. Мельникова², С.Ф.
Маренкин³,

А.И. Риль³, Гаджиалиев М.М., Пирмагомедов З.Ш.

*e-mail: l.saypulaeva@gmail.com

¹ Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

² Уральский федеральный университет, Институт естественных наук и математики, Екатеринбург.

³ Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва.

Представлены результаты исследования магнитосопротивления в n-CdAs₂ в условиях влияния высокого давления. Влияние магнитного поля на электросопротивление CdAs₂ изучали в полях до 1 Тл. Поперечное магнитное поле прикладывали после полной стабилизации электросопротивления при фиксированных давлениях. Принцип создания давлений до 50 ГПа, технические характеристики и градуировка КВД описаны в деталях в [1-3]. Влияние всестороннего давления на электросопротивление, коэффициент Холла нами были исследованы на образцах A²V⁵ до 9 ГПа. Максимальное давление, прикладываемое к образцу, в указанных работах не превышало 9 ГПа. Осталась не выяснена структура новой фазы высокого давления, известно, лишь, что это переход полупроводник-полупроводник и, что он полностью обратим при снятии давления, поэтому были продолжены исследования при более высоких давлениях.

На рисунке (1.а) представлена зависимость магниторезистивного эффекта от давлений (MR(P)) при различных полях для первого цикла увеличения давления. Во всём диапазоне давлений наблюдалось отрицательное магнитосопротивление (ОМС).

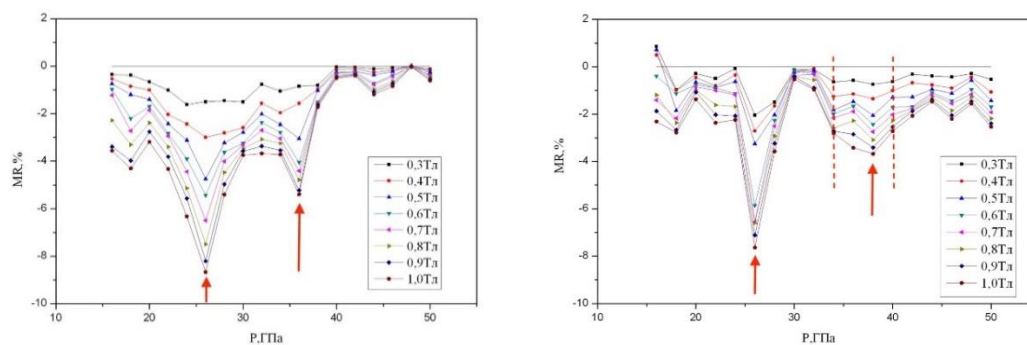


Рисунок 1 – Зависимость магнитосопротивления CdAs₂ от давления при различных магнитных полях: а) первый цикл увеличения давления; б) второй цикл увеличения давления.

В ходе экспериментов, действительно, удалось наблюдать резкое увеличение отрицательного магнитосопротивления в областях давлений, предшествующих структурным изменениям в исследуемом образце.

1. L.F. Vereshchagin, E.N. Yakovlev, B.V. Vinogradov, G.N. Stepanov, K.Kh. Bibaev, T.I. Alaeva, V.P. Sakun. High Temperatur.–High Press. 6, 499 (1974).
2. A.N. Babushkin, G.I. Pilipenko, F.F. Gavrilov. J. Phys.: Condens. Matter. 5, 8659 (1993).
3. A.N. Babushkin. High Press. Res. 6, 349 (1992).

МАГНИТОТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА α''' - $(\text{Cd}_{0.5}\text{Zn}_{0.5})_3\text{As}_2$, ПОДВЕРГНУТЫХ ГИДРОСТАТИЧЕСКОМУ ДАВЛЕНИЮ.

Л.А.Сайпулаева¹, В.С.Захвалинский², А. Г.Алибеков¹, З.Ш.Пирмагомедов¹,
М. М. Гаджалиев¹, А. В. Кочура³, С.Ф. Маренкин³,
А.И. Риль³, Т.Р.Арсланов¹.

*e-mail: l.saypulaeva@gmail.com

¹Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия

²Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
Белгород, Россия

³Юго-Западный государственный университет, г. Курск, Россия

⁴Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва.

Первые исследования $\text{Cd}_{3-x}\text{Zn}_x\text{As}_2$ в условиях гидростатического давления до 12000 бар при комнатной температуре проведены в работе [1].

Данная работа посвящена исследованию удельного электрического сопротивления, коэффициента Холла и магнетосопротивления α''' - $(\text{Cd}_{0.5}\text{Zn}_{0.5})_3\text{As}_2$ в диапазоне более высоких (до 9 ГПа) давлений, что позволили нам получить новые результаты. Для создания высокого давления использовалась камера типа «Тороид» [2]. Параметры исследованного образца ρ , Ом·см = 12, $-R_H$, см³/Кл = 3000, n , см⁻³ = $3.8 \cdot 10^{15}$. Кристаллическая структура соответствует α''' -полиморфной модификации, которая наблюдалась ранее для некоторых составов твердых растворов арсенид кадмия – арсенид цинка [3,4]. Эта структура является тетрагональной (п. г. $I4_1/amd$) с параметрами $a = b = 8.55 \text{ \AA}$ и $c = 24.13 \text{ \AA}$.

Исследованы и изучены температурные, барические зависимости α''' - $(\text{Cd}_{0.5}\text{Zn}_{0.5})_3\text{As}_2$. Обнаружено, что зависимое от температуры удельное сопротивление демонстрирует изменение полупроводникового характера. На температурной зависимости коэффициента Холла $R_H(T)$ в интервале 200-220 К происходит смена типа носителей - переход от материала p-типа к материалу n-типа. Слабо зависящий от температуры коэффициент Холла указывает на то, что при $T < 200 \text{ K}$ основными носителями тока являются дырки.

Показано, что увеличение давления приводит к подавлению положительного магнетосопротивления. В поле 5 кЭ и при давлении $P = 5.4 \text{ ГПа}$ отрицательное магнетосопротивление составляет максимальное значение. Изменения полевых зависимостей магнетосопротивлений несимметричны в положительных и отрицательных магнитных полях.

1. Cisowski and W. Zdanowicz, Influence of Pressure on the Electrical Properties of $\text{Cd}_{3-x}\text{Zn}_x\text{As}_2$ Solid Solutions, Phys. Stat. Sol. (a) 19, 741 (1973).
2. Khvostantsev L.G., Slesarev V.N., and Brazhkin V.V. Toroid type high-pressure device: history and prospects// High Pressure Res. Vol. 24. P. 371–383 (2004).
3. Volodina G.F. et al. 2013. Crystal Structure of α''' - $(\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x)_3\text{As}_2$ ($x = 0.26$). Crystallography Reports, 58(58):563-567;
4. Zakhvalinskii V. S., Nikulicheva T. B., Kochura A. V., Lahderanta E., Shakhov M., Kubankin A. S., Sukhov M., Yaprincev M. N., and Morocho A. A. 2021. Mixed conductivity analysis of single crystals of α''' - $(\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{As}_2$ ($x = 0.45$). Materials Science. AIP, 11 (3): 035028.

ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В Cd_3As_2 ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Л.А. Сайпулаева^{1*}, А.Н. Бабушкин², А.В. Тебеньков², Н.В. Мельникова²,
Я.Ю. Волкова², С.Ф. Маренкин³, А.И. Риль³, Пирмагомедов З.Ш., Гаджиалиев
М.М., Гаджиев А.М.

*e-mail: l.saypulaeva@gmail.com

¹Институт физики им. Х. И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН.

²Уральский федеральный университет, Институт естественных наук и математики.

³Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН.

Исследованы барические зависимости термоэдс и поперечного магнитосопротивления на монокристаллических образцах $n\text{-CdAs}_2$ при комнатной температуре. Измерения CdAs_2 выполнены в камере высокого давления (КВД) [1]. Исследуемые образцы, получаемые сжатием в КВД, имели толщину от 10 мкм до 30 мкм и диаметр около 0.2 мм. Градуировка КВД и технические детали подробно описаны в работах [1-3]. Обнаружен эффект отрицательного магнитосопротивления, величина которого возрастала с ростом внешнего магнитного поля. Максимальная величина отрицательного магнитосопротивления составляла 8% в поле 1Тл. Установлено, что увеличение магнитного поля приводит к уменьшению электро-сопротивления. Обнаружен резкий рост отрицательного магнитосопротивления в области давлений, предшествующих структурным изменениям.

На рисунке 1 представлена дифрактограмма исследованного нами образца в алмазной камере при атмосферном давлении. Видны рефлексы исходной тетрагональной фазы, и пики, принадлежащие рениевой гаскете.

На рисунке 2 представлены полученные дифрактограммы при давлениях 6; 9.75. Из рисунка 2а видно, что предсказанный в [4] по электрическим свойствам фазовый переход произошел при 6 ГПа. При давлении 9,75 ГПа значительная доля исходной тетрагональной фазы всё еще существует (рис.2б). Новая фаза не идентифицирована, на рисунке ее пики обозначены как phase 2.

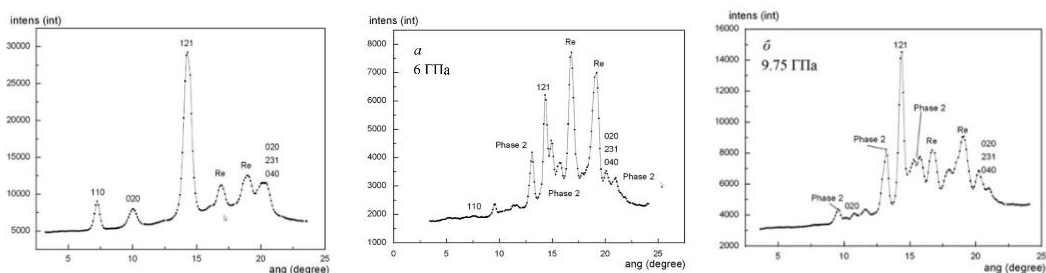


Рис.1 – дифрактограмма CdAs_2 в алмазной камере при атмосферном давлении

Рис. 2-3 - Дифрактограммы при давлениях 6; 9.75 ГПа.

Итак, согласно рентгеноструктурным исследованиям, можно однозначно выделить два фазовых перехода в CdAs_2 при высоких давлениях: при $P \approx 6$ ГПа и $P \geq 20$ ГПа.

1. L.F. Vereshchagin, E.N. Yakovlev, B.V. Vinogradov, et al. // High Temperatures – High Pressures.– 1974.– № 6. С.– 499.
2. Babushkin A.N. // High Press. Res.– 1992.– № 6. С.– 349.
3. Babushkin A.N., Pilipenko G.I., Gavrilo F.F. // J.Phys.: Condens. Matter.– 1993.– № 5. С.– 8659.
4. А.Ю. Моллаев, Л.А. Сайпулаева, А.Г. Алибеков и др. // ФТП.– 2009.– Т.43.– № 6 С.– 730.

Electrophysical Properties and Structure of GaSe-Sb₂Se₃ eutectic composites
G.B Ibragimov^a, M.V Kazimov^a, G.I Isakov^a, R.I, Alekperov^a, B.G Ibragimov^b
Ministry of Science and Education Republic of Azerbaijan, Institute of Physics^a
AZ 1143, Baku, H. Javid ave., 131
Azerbaijani-French University (UFAZ)^b
Azerbaijan, Baku, Nizami str. 183
 mobilkazimov@gmail.com

Among the many applications of solar energy, photovoltaic solar cells are considered the most efficient way to harness solar energy by converting solar energy directly into electricity. In recent years, Sb₂Se₃ has attracted great interest due to its thermoelectric efficiency and photovoltaic properties [1-3]. Therefore, solar panels with special coating, optical and thermoelectric cooling devices have their own characteristics [4]. GaSe crystals are widely used in photoconductive and non-linear optical material [5].

Eutectic systems retain the properties of their constituent compounds, and these physical properties are controllable [6-7]. Therefore, due to the important properties of Sb₂Se₃ and GaSe compounds, it is important to study GaSe-Sb₂Se₃ eutectic systems that include the properties of both components. In this study DSC, XRD analysis of GaSe-Sb₂Se₃ systems, and Volt-ampere characterization of alloys were studied. Fig.1 shows the DSC curve of the GaSe-Sb₂Se₃ eutectic composite in the temperature range of 0÷873K.

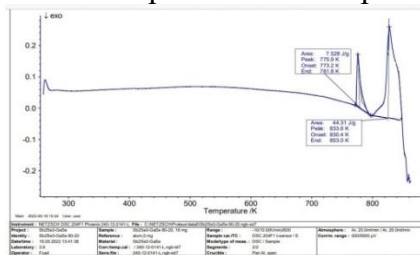


Fig. 1. DSC curves of the Sb₂Se₃-GaSe eutectic composite.

Three eutectic points were studied in the GaSe-Sb₂Se₃ system. It was determined that the composition of the three eutectics formed in the GaSe-Sb₂Se₃ systems is 20; 45 and 55 wt % Sb₂Se₃, melt points were 775K, 698K and 725K respectively. The structure of GaSe-Sb₂Se₃ eutectic systems was studied with an electron microscope (FESEM) and X-ray spectrograph. SEM and EDX analysis show that the obtained eutectics present two phase systems. Anisotropy was observed in the electrical properties of eutectic systems. Depending on the direction of crystallization, the degree of anisotropy was ~10³.

Reference

1. Mavlonov A., et al., Structural and morphological properties of PLD Sb₂Se₃ thin films for use in solar cells, *Solar Energy*, Vol.208, 15 September 2020, p. 451-456
2. Wen X., Chen C., Lu S. et al., Vapor transport deposition of antimony selenide thin film solar cells with 7.6% efficiency. *Nat. Commun.* 2018, 9, 1–10
3. Geoffrey Tse, Dapeng Yu, The Structural, Electronic, Optical and Elastic Properties of ε-Type Gallium Selenide: A First Principle Study, *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*, 2016, 11(5):551-567
4. Kazimov M. V., Synthesis and structural analysis of InSb-CrSb, InSb-Sb, GaSb-CrSb eutectic composites, *Journal of Optoelectronic and Biomedical Materials* Vol. 12, No. 3, July - September 2020, p. 67 - 72
5. Kazimov M.V., İbragimov G.B., İsakov G.I., Ibragimov B.G., Physical-chemical properties of InSb+Mg₃Sb₂ eutectic systems: Synthesis, Characterization, And Applications, *Journal of Optoelectronic and Biomedical Materials*, Romania №14 (4), pp.187-190, 2022
6. Kazimov M.V, İbragimov G.B., İsakov G.I., et al., Synthesis and structural analysis of InSb-CrSb and InAs-CrAs eutectic composites, *Актуальные Научные Исследования, VI Международной Научно-Практической Конференции* : в 4 ч., том. часть 1, p. 35-38

**ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ АМОРФНОГО СПЛАВА
 $Al_{88}Ni_6Nd_6$** **Ужакин П.А., Чиркова В.В., Волков Н.А., Абросимова Г.Е.***Институт физики твердого тела им. Ю.А.Осипьяна РАН, г. Черноголовка, Россия*

uzhakin@issp.ac.ru

В настоящее время с развитием технологий постоянно растет спрос на новые материалы, обладающими хорошими физико-химическими свойствами. Такими материалами являются аморфные и нанокристаллические сплавы. Аморфные сплавы получают с методом скоростной закалки расплава. При охлаждении со скоростью около 10^6 К/сек фиксируется структура расплава, поэтому затвердевший сплав имеет аморфную структуру. Из-за такой структуры, являющейся неравновесной, свойства этих сплавов сильно отличаются от свойств кристаллических сплавов того же состава. Установив зависимость свойств материалов от их структуры и состава можно получать материалы с требуемым комплексом свойств.

Для исследования был выбран сплав с составом $Al_{88}Ni_6Nd_6$. Интерес к аморфным сплавам системы Al-ПМ-РЗМ (ПМ – переходный металл, РЗМ – редкоземельный элемент) вызван хорошими прочностными характеристиками при малом удельном весе. Состав образца контролировался методом рентгеноспектрального анализа на сканирующем электронном микроскопе Supra 50VP. Исследование структуры образцов проводилось на рентгеновском дифрактометре SIEMENS D-500 с использованием $Co\ K\alpha$ излучения. Тепловые характеристики фазовых превращений при переходе из аморфного в равновесное кристаллическое состояние определялись методом калориметрии дифференциальном сканирующей калориметре Perkin Elmer DSC-7. Измерения проводились при нагревах с постоянной скоростью, скорости нагрева составляли 5, 10 и 20 К/мин).

Исследование показало, что кристаллизация аморфного сплава $Al_{88}Ni_6Nd_6$ протекает в три стадии. Температура начала и тепловой эффект первой стадии кристаллизации составляет $188^\circ C$ и 28,7 Дж/г; второй стадии $296^\circ C$ и 31,7 Дж/г; третьей стадии $340^\circ C$ и 22,5 Дж/г, соответственно. По данным калориметрии произведен расчет энергии активации кристаллизации аморфного сплава. Энергия активации кристаллизации аморфного сплава $Al_{88}Ni_6Nd_6$ составляет $E_a = 303,61$ кДж/моль, что хорошо согласуется с данными об энергии активации сплавов Al-ПМ-РЗМ, представленными в работе [1]. После нагрева до температур, соответствующих каждой стадии кристаллизации, проводились исследования структуры. Было установлено, что на первой стадии кристаллизации происходит образование нанокристаллов алюминия, и после ее окончания структура состоит из нанокристаллов алюминия и оставшейся аморфной матрицы. При повышении температуры происходит образование интерметаллидов и после третьей стадии кристаллизации структура сплава является полностью кристаллической.

Работа была выполнена в рамках госзадания ИФТТ РАН.

Литература

1. Huang Z.H., Li J.F., Rao Q.L., Zhou Y.H., Primary crystallization of Al-Ni-RE amorphous alloys with different type and content of RE Mater. Sci.Eng. A 489 (2008) 380–388.

TOWARDS TO THEORY OF THE X-RAY DIFFRACTION TOMOGRAPHY OF CRYSTALS WITH NANO-SIZED DEFECTS

Grigorev V.A., Konarev P.V., Chukhovskii F.N., Volkov V.V.

FSRC "Crystallography and Photonics" RAS, Moscow, Russia

E-mail: vasilyi.grigorev.1996@mail.ru

In the last 10 years, the X-ray diffraction tomography (XRDT) technique has been widely applied to 3D computer recovery and qualitative diagnostics of the linear and point defects in crystals [see, *e.g.* 1-4]. It is important that in the scope of the XRDT technique one acquires a set of the 2D projection topograms for different values of the sample rotation angle Φ around the diffraction vector \mathbf{h} , which is related to some inclination of the diffraction X-ray plane. In Fig. 1, the axis OS is directed along the wave vector \mathbf{k}_h of the diffracted wave propagated through a sample. To be specific, one of the significant stages of the computer XRDT recovery problem becomes the adequate theoretical approach to evaluate the 2D imaging patterns (2D IPs, *i.e.*, topograms) involved into the 3D defect retrieval processing by using the XRDT χ^2 -target function minimization procedure (see [3, 4]).

In the present report, in contrast of the semi-kinematic analytical solution of the dynamical Takagi-Taupin equations (TTEs) for the diffracted wave amplitude $E_h(\mathbf{r})$ [3], to evaluate the one applies the consequent theoretical approach based on numerical solution of the TTEs. Aiming a goal that the validation of the 2D IPs numerical simulation results is very sensitive to resolve the inverse XRDT issue, one applies and compare the two differential TTEs solution schemes. One of them is based on the TTEs in the conventional shape [1] (*cf.* [5] as well) whereas the second one suggests of using the initial shape of the TTEs when the defect displacement field function $f(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) = \mathbf{h} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$ is involved as the phase factor of the dynamical coefficients of the electric susceptibilities (see, *e.g.*, [3,5]). For both the differential algorithms of the TTEs numerical solutions, the detailed analysis of validation of simulation results has been carried out in the case of the Coulomb-type point defect in crystal Si(111) for the following XRDT parameters (Figs. 2, 3): diffraction vector $\mathbf{h} = [2\bar{2}0]$; the Mo $K_{\alpha 1}$ -radiation wavelength $\lambda=0.071$ nm; the Bragg angle $\theta_B = 10.65^\circ$; the sample thickness is equal to the extinction length $\Lambda=36.287$ μm ; the sample rotation angle $\Phi = 0$.

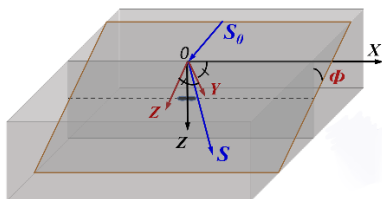


Fig. 1

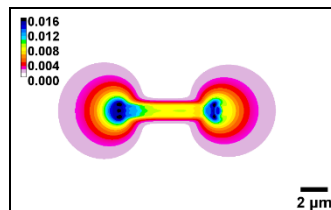


Fig. 2

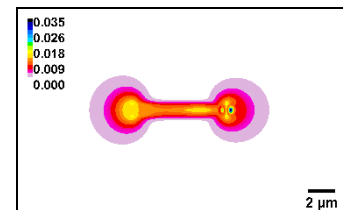


Fig. 3

References

- [1] Besedin, I.S., Chukhovskii, F.N., Asadchikov, V.E. (2014). *Cryst. Rep.* **59**, 323-330.
- [2] Asadchikov, V., Buzmakov, A., Chukhovskii, F., Dyachkova, I., Zolotov, D., Danilewsky, A., Baumbach, T., Bode, S., Haaga, S., Daniel Hanschke, D., Kabukcuoglu, M., Balzer, M., Caselle, M., & Suvorov, E. (2018). *J. Appl. Cryst.* **51**, 1616–1622.
- [3] Chukhovskii, F.N., Konarev, P.V., Volkov, V.V. (2020) *Acta Cryst. Section A*. **A76**, 163-171.
- [4] Chukhovskii, F. N., Konarev, P. V., Volkov, V. V. Challenges of Decoding Data in Spectroscopy, Reflectometry, X-Ray and Electron Diffraction. Book: Cambridge Scholars Publishing. 2022. 1-109.
- [5] Epelboin, Y., Authier, A. (1983) *Acta Cryst.* **A39**, 767-774.

THE THERMOELECTRIC POWER OF SUPERCONDUCTING $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{0.6}\text{Zn}_{0.4}\text{Cu}_2\text{O}_{8+x}$

Ragimov S.S.^{1,2}, Agayeva G.I.², Babayeva A.E.²

¹ *Institute for Physical Problems, Baku State University, Baku, Azerbaijan*

² *Institute of Physics of Azerbaijan Ministry of Science and Education, Baku, Azerbaijan*

e-mail: sadiyar.raqimov@bsu.edu.az; sadiyar@mail.ru

To improve the superconducting properties of Bi-based HTSC, the main content elements may be replaced by other ones. In this case a change of the concentration of charge carriers affects to the superconducting critical temperature T_c [1].

It was investigated the temperature dependence of the specific resistivity and thermoelectric power of polycrystalline sample $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{0.6}\text{Zn}_{0.4}\text{Cu}_2\text{O}_{8+x}$ with a partial replacement of Ca by the Zn element of the Bi-2:2:1:2 system in the 75-300K temperature interval.

The investigated polycrystalline sample $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{0.6}\text{Zn}_{0.4}\text{Cu}_2\text{O}_{8+x}$ was prepared by the solid-state ceramic technique. At the first stage the powders of CaCO_3 , SrCO_3 and CuO in the desired ratio were mixed and synthesized at 1173-1243K for 30 hours. At the second stage the Bi_2O_3 and ZnO were added.

The phase purity of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{0.6}\text{Zn}_{0.4}\text{Cu}_2\text{O}_{8+x}$ was investigated by using a Bruker - D8 advance diffractometer. According to the intensities of the diffraction peaks, the main phase is tetragonal phase. It was observed the additional diffraction peaks in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{0.6}\text{Zn}_{0.4}\text{Cu}_2\text{O}_{8+x}$ do not correspond to $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$.

The experimental results of specific resistivity and thermal power (Seebeck) effect were obtained by the four-point probe technique. From the temperature dependence of specific resistivity was determined the critical temperature of superconducting transition ($T_c=78\text{K}$). It was observed that the temperature dependence of thermal power goes through a maximum at $T\sim 126\text{K}$. The maximum value of thermal power is 6.1mkV/K . Below T_c the temperature dependence of thermal power coefficient rapidly fall to zero. The thermal power sign is positive in all investigated temperature interval. This is indicated that the positive carriers are dominant. At temperatures above the maximum ($T>T_{\text{max}}$), the thermal power decreases linearly with increasing temperature. The temperature dependence of thermoelectric power has a negative slope with values of $dS/dT = -0,029\mu\text{V/K}^2$. This behavior indicates to fact that, the electrons appear in conductivity. The obtained experimental results on the thermal power were analyzed on the framework of Xin's two band model [2]. The band gap of the semiconductor type Bi-O layers ($E_g=0.059\text{ eV}$) and the concentration of holes per copper atom ($p=0.1965$) are determined. It was shown that the partial replacement of the calcium element with zinc in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_{0.6}\text{Zn}_{0.4}\text{Cu}_2\text{O}_{8+x}$ does not change the structure of Bi-O layers. This is related by fact that, due to different values of ionic radii, zinc atoms cannot completely occupy the place of the calcium element. Because of this zinc atoms are located in intermediate sections of the unit cell.

References

- [1] S.S.Ragimov, I.N.Askerzade, G.I.Agayeva, The influence of Zn on superconducting properties of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{Ca}_1\text{Cu}_2\text{O}_x$ Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, 2019, v.32, N10, p.3033-3036, <https://doi.org/10.1007/s10948-019-5010-y>
- [2] Y. Xin, K. W. Wong, C. X. Fan, Z. Z. Sheng, and F. T. Chan, Thermoelectric power of the thallium-based superconductor $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10-x}$, J. Phys. Rev.B, 1993-I, v.48, №1, p.557-560, DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.48.557>

ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $(\text{AgSbTe}_2)_{0.9}(\text{PbTe})_{0.1}$ **Рагимов С.С.^{1,2}, Гашымова Н.Н.³, Babayeva A.E²**¹*Институт Физических Проблем Бакинского Государственного Университета,
Баку, Азербайджан*²*Институт Физики Министерство Науки и Образования Азербайджана, Баку,
Азербайджан*³*Азербайджанский Государственный Университет Нефти и Промышленности,
Баку, Азербайджан*

e-mail: sadiyar.raqimov@bsu.edu.az; sadiyar@mail.ru

В данной работе приводятся результаты исследования теплопроводности $(\text{AgSbTe}_2)_{0.9}(\text{PbTe})_{0.1}$ в температурном интервале 80-550К.

Исследования показали, что значение теплопроводности $(\text{AgSbTe}_2)_{0.9}(\text{PbTe})_{0.1}$, как и AgSbTe_2 , очень мала и слабо зависит от температуры. Слабая температурная зависимость теплопроводности может быть связана с малой величиной длины свободного пробега коротковолновых акустических фононов по сравнению с размерами элементарной ячейки. Этот факт свидетельствует об отклонении от чисто фононного механизма переноса тепла. С другой стороны известно, что оптические моды в AgSbTe_2 имеют низкие частоты и перекрываются акустическими модами. По этой причине низкочастотные оптические и высокочастотные акустические моды могут сильно взаимодействовать. Имеющее место высокая степень ангармонизма связей Sb-Te, приводит к сильным фонон-фононным взаимодействиям.

Отметим, что одной из основных причин низкого значения решеточной теплопроводности является эффективное рассеяние фононов на сильно разупорядоченной решетке Ag/Sb. Известно, что AgSbTe_2 кристаллизуется в кубической фазе со структурой NaCl, где ионы Ag и Sb случайным образом распределены между плотно упакованными слоями ионов теллура. Это вносит искажения в кристаллическую решетку и приводит к эффективному рассеянию фононов сильно разупорядоченной решеткой Ag/Sb. Таким образом, атомные смещения и деформации составляют основной источник фононного рассеяния, и приводит к снижению теплопроводности.

Термоэдс, электропроводность и электронный вклад теплопроводности зависят от зонных параметров, таких как ширина запрещенной зоны (E_g), эффективную массу (m^*) и механизмы рассеяния носителей заряда. Как видно, ширина запрещенной зоны для термоэлектрических материалов имеет существенное значение.

Для определения ширины запрещенной зоны $(\text{AgSbTe}_2)_{0.9}(\text{PbTe})_{0.1}$ были проведены спектральные эллипсометрические исследования. Определены спектры оптических постоянных и диэлектрической проницаемости в области энергий фотонов 0.07-6.5эВ. Для описания полученных спектров применены различные теоретические модели [1]. Показано, что на оптические свойства, форму края поглощения и структуру запрещенной зоны существенное влияние оказывает пространственная структурная разупорядоченность кристаллов $(\text{AgSbTe}_2)_{0.9}(\text{PbTe})_{0.1}$. На основе анализа полученных спектров и с применением различных методов определена величина ширины запрещенной зоны $(\text{AgSbTe}_2)_{0.9}(\text{PbTe})_{0.1}$, $E_g=0.19$ эВ.

[1] S.S.Ragimov, V.E.Bagiev, A.I.Alieva, A.A.Saddinova, SEMICONDUCTORS, 2021, Vol. 55, No. 4, pp.928-935, <https://doi.org/10.1134/S106378262104014X>

ЭЛЕКТРОН-ПЛАЗМОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{--Sb}_2\text{Te}_3$

Степанов Н.П.

Забайкальский государственный университет, г. Чита, Россия, np-stepanov@mail.ru

Кристаллы $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{--Sb}_2\text{Te}_3$ продолжают исследоваться, поскольку используются в термоэлектрическом материаловедении. Спецификой этих материалов является то, что в них оказываются сопоставимыми энергии элементарных возбуждений в электронном и плазмоне спектрах. Так, в работе [1] дано описание особенностей в поведении температурной зависимости магнитной восприимчивости кристалла $\text{Bi}_{0.6}\text{Sb}_{1.4}\text{Te}_3$, и приведены данные, указывающие на то, что они наблюдаются при сближении энергий плазмона E_p и зазора ΔE , отделяющего уровень химического потенциала от подзоны тяжелых дырок.

В данном сообщении приводятся спектры коэффициента отражения кристалла $\text{Bi}_{0.6}\text{Sb}_{1.4}\text{Te}_3$, полученные в области наблюдения плазменных эффектов, обусловленных свободными носителями заряда. Спектры получены при фиксированных температурах, в диапазоне от 78 до 292 К, на инфракрасном Фурье-спектрометре IFS-113V (Bruker). Угол между падающим лучом и оптической осью кристалла C_3 , перпендикулярной отражающей поверхности, равен 7 градусов. Использовался криостат «Oxford», обеспечивавший стабилизацию температуры с точностью 2 К. Результаты исследования приведены на рис.1 и рис.2.

Как видно из рис.1, при температуре кристалла 292 К, наблюдается размытый плазменный край. При уменьшении температуры он смещается в высокочастотную часть спектра, что обусловлено увеличением концентрации легких дырок вследствие уменьшения интенсивности тепловых переходов электронов из подзоны тяжелых дырок на уровень химического потенциала, расположенный в подзоне легких дырок. Отметим, что этот процесс также является наиболее вероятной причиной аномального температурного поведения коэффициента Холла в кристаллах $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{--Sb}_2\text{Te}_3$ [2]. Из рис.1 видно, что при уменьшении температуры изменяется форма плазменного края, а пик функции энергетических потерь – $\text{Im } \epsilon^{-1}$, представленной на рис.2, расщепляется. Представленные данные подтверждают предположение о том, что уменьшение температуры приводит к сближению энергий плазмона E_p и ΔE , и, как следствие, к усилению электрон-плазмонного взаимодействия, оказывающего влияние на физические свойства кристалла $\text{Bi}_{0.6}\text{Sb}_{1.4}\text{Te}_3$ [1].

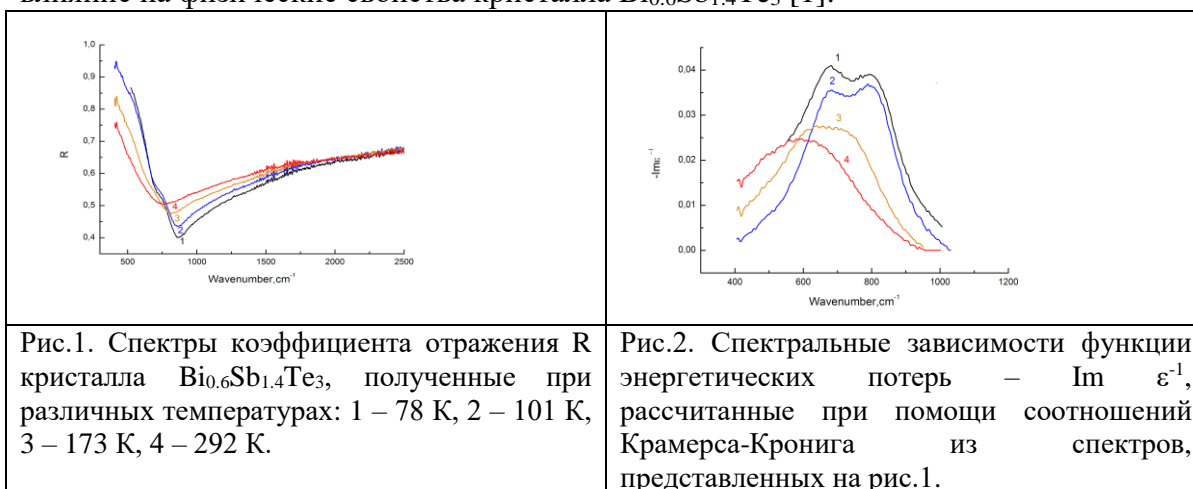


Рис.1. Спектры коэффициента отражения R кристалла $\text{Bi}_{0.6}\text{Sb}_{1.4}\text{Te}_3$, полученные при различных температурах: 1 – 78 К, 2 – 101 К, 3 – 173 К, 4 – 292 К.

Рис.2. Спектральные зависимости функции энергетических потерь – $\text{Im } \epsilon^{-1}$, рассчитанные при помощи соотношений Крамерса-Кронига из спектров, представленных на рис.1.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-20055, <https://rscf.ru/project/22-22-20055/>, при финансовой поддержке правительства Забайкальского края.

1. Степанов Н.П., Иванов М.С. Физика и техника полупроводников, **56** (12), 1103 (2022).

2. Гольцман Б.М., Кудинов В.А., Смирнов И.А. Полупроводниковые термоэлектрические материалы на основе Bi_2Te_3 . (М., Наука, 1972).

ОСОБЕННОСТИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ В МАГНИЕВОМ СПЛАВЕ ZEK100

Храпова Н.Н., Страумал Б.Б., Орлов В.И., Цой К.В.,
Давдян Г.С., Дружинин А.В.

*Институт Физики Твёрдого Тела РАН, г. Черноголовка, Россия,
nkhrapova@issp.ac.ru*

Магниево-цинковые сплавы находят широкое применение в авиационной, ракетной и автомобильной промышленности благодаря своим исключительным механическим свойствам. Большой интерес среди магниевых сплавов представляет сплав группы Mg-Zn-Zr ZEK100, который имеет небольшую массовую долю легирующих элементов, низкую температуру формования и хорошую способность выдерживать как статические, так и усталостные нагрузки.

Сплав ZEK100, как и все магниевые сплавы, подвержен хрупкому разрушению из-за характерной магнию гексагональной структуры. Однако на хрупкое разрушение данного сплава также оказывает присутствие твёрдых и хрупких интерметаллических частиц вдоль границ зёрен. Эти частицы сильно влияют на макроскопические свойства сплава, приводя не только к хрупкому разрушению, но также, в зависимости от распределения этих частиц, к значительному упрочнению сплава.

Анализ литературных источников показал, что фазовые переходы смачивания границ зёрен в сплаве ZEK100 ранее не изучались.

Таким образом, целью данной работы было исследовать фазовый переход смачивания в магниевом сплаве ZEK100.

В ходе данной работы были проведены подготовка образцов, отжиги в диапазоне температур, когда существует жидкая фаза, и металлографическая подготовка отожжённых образцов. Структура отожжённого образца была проанализирована с помощью электронного микроскопа Versa 3D FEI, а микротвёрдость изучена с помощью метода Виккерса. По полученным данным была рассчитана доля смоченных границ зёрен и средняя твёрдость фаз, составляющих структуру образца.

В ходе исследования было доказано существование фазового перехода смачивания в магниевом сплаве ZEK100, и температуры, при которых он происходит, были определены экспериментально. Было обнаружено, что большая часть легирующих элементов сконцентрирована на границах зёрен в фазе интерметаллида, которая обладает существенно большей твёрдостью, чем матричная фаза магния. Согласно полученным результатам в то время, как твёрдость матричной фазы магния не зависит от температуры, а распределение фазы интерметаллида меняется от температуры отжига, были обнаружены изменения в механических свойствах данного сплава, вплоть до его хрупкого разрушения под действием закалочных напряжений при большой доле смоченных границ зёрен. Таким образом, мы можем утверждать, что именно морфология расположения зернограницных фаз оказывает существенное влияние на суммарные механические свойства сплава.

Иными словами, знание о характере протекания фазового перехода смачивания на границах зёрен даёт возможность контролировать структуру сплава для достижения необходимых свойств.

Дальнейшее исследование фазовых превращений на границах раздела в металлах, в частности, в литейных магниевых сплавах, является перспективным направлением науки.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 21-72-10046.

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ФРУСТРИРОВАННОЙ МОДЕЛИ ПОТТСА

Рамазанов М.К., Муртазаев А.К., Магомедов М.А., Мазагаева М.К.

Институт физики ДФИЦ РАН, Махачкала, Россия, sheikh77@mail.ru

В настоящее время в физике конденсированного состояния продолжают интенсивные исследования фазовых переходов (ФП), критических, магнитных и термодинамических свойств спиновых систем с фрустрациями [1]. Фрустрированные спиновые системы обладают богатой природой ФП и имеют особенности магнитного, термодинамического и критического поведения. Включение возмущений различной природы, таких как внешнее магнитное поле может привести к совершенно новому физическому поведению таких систем [2].

В данной работе нами методом Монте-Карло изучается влияние внешнего магнитного поля на характер ФП двумерной четырехвершинной модели Поттса на гексагональной решетке. При учете антиферромагнитных взаимодействий вторых ближайших соседей данная модель становится фрустрированной [3]. Интерес к этой модели обусловлен тем, что модель Поттса служит основой теоретического описания широкого круга физических свойств и явлений в физике конденсированных сред: сложные анизотропные ферромагнетики, спиновые стекла, многокомпонентные сплавы и жидкие смеси.

Гамильтониан исследуемой модели имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 H &= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} S_i S_k - h \sum_{\langle i \rangle} S_i = \\
 &= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} \cos \theta_{i,k} - h \sum_{\langle i \rangle} S_i,
 \end{aligned} \tag{1}$$

где J_1 и J_2 – параметры обменных ферро- ($J_1 > 0$) и антиферромагнитного ($J_2 < 0$) взаимодействия соответственно для ближайших и следующих за ближайшими соседями, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$, h – величина магнитного поля (h приводится в единицах J_1). В данном исследовании нами рассматривается случай, когда $|J_1| = 1$, а $|J_2| = 0.5$, при котором рассматриваемая модель становится фрустрированной. Величина внешнего магнитного поля менялась в интервале $0.0 \leq h \leq 7.0$. Магнитное поле направлено вдоль одного из направлений спина.

Для изучения рода ФП нами использовался гистограммный метод анализа данных метода МК. Результаты, полученные на основе этого метода, показывают, что в данной модели для значения поля $h = 0.5$ наблюдается ФП первого рода. Обнаружено, что в зависимости вероятности $P(E)$ от энергии E наблюдаются два хорошо выраженных максимума. Наличие двойного пика на гистограммах распределения энергии является достаточным условием для ФП первого рода. Можно предположить, что природа ФП зависит от магнитной структуры основного состояния, которая в свою очередь меняется под влиянием внешнего магнитного поля.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dotsenko V.S. Phys. Usp. - 1995. - V. 38. - P. 457-496.
2. Сосин С.С., Прозорова Л.А., Смирнов А.И. УФН. - 2005. - Т. 175. - С. 92-99.
3. Муртазаев А.К., Мазагаева М.К., Рамазанов М.К., Магомедов М.А., Муртазаева А.А. ФТТ. - 2021. - Т. 63. - вып. 5. - С. 622 - 627.

МЕХАНИЗМ РАЗРУШЕНИЯ ГЕТЕРОГЕННОГО ТВЕРДОГО ТЕЛА ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ УДАРНЫХ ВОЛН И АНАЛИЗ ВТОРИЧНЫХ ЭФФЕКТОВ С НАНОСЕКУНДНЫМ ВРЕМЕННЫМ РАЗРЕШЕНИЕМ

Махмудов Х. Ф.¹, Щербаков И. П.¹

¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург,
h.machmoudov@mail.ioffe.ru

При разряде в образце возникала ударная волна, которая, добравшись до поверхности образца, вызывала вылет струи плазмы (рис. 1. Фотография плазмы, а,б,в,г).

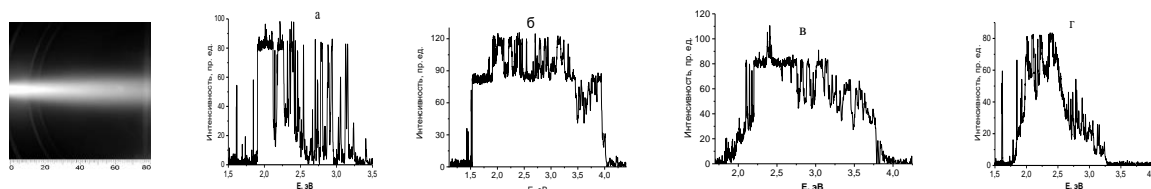


Рис. 1. Фотография плазмы, вылетевшей из кварца под влиянием ударной волны.

Спектры излучения плазмы, вылетевшей из кристалла кварца (а), кальцита (б), аляскита (в), плагиогранита (г).

Спектры плазмы, вылетевшей из исследуемых образцов, приведены на рис. 1. Они состоят из нескольких десятков, наложенных друг на друга узких полос. Для интерпретации спектров использовали таблицы спектральных линий. Оказалось, что наибольшее число полос соответствует излучению положительно заряженных ионов и атомов элементов, из которых состоят кристаллические решетки минералов, входящих в состав исследованных пород [1,2]. Так, спектры плазмы, вылетевшей из кварца, соответствовали излучению атомов и положительно заряженных ионов кремния, заряд которых изменялся от 1 до 4, а также атомов и положительно заряженных ионов кислорода, заряд которых изменялся от 1 до 3. Из гранитов вылетали положительно заряженные ионы и атомы Si, O, K, Ca, Al и Na, входящие в состав кристаллических решеток кварца и полевых шпатов [1]. Из кальцита вылетали положительно заряженные ионы и атомы Ca, C и O [2].

Какова же причина различного заряда ионов? За время существования плазмы ионы сталкиваются с электронами и друг с другом. Это и приводит к уменьшению заряда ионов вплоть до нуля, т.е. появлению атомов. В спектрах плазмы гранитов наблюдали спектры положительно заряженных ионов примесей - Fe и Mn, а также ионов Cu, вылетевших из стенок медной камеры, и ионов азота, образовавшихся при бомбардировке молекул азота воздуха потоками плазмы. После разрушения оставались фрагменты образцов с размерами от нескольких мкм до нескольких мм. Их вес составлял ~ 20% от веса исходного образца. Плазма, вылетевшая из минералов, тоже в основном состоит из положительно заряженных ионов. Это позволило предложить, что ударная волна, отражаясь от поверхности породы, искажает кристаллические решетки минералов настолько, что межатомные связи в них распадаются. В результате поверхность породы испаряется путем вылета положительно заряженных ионов и электронов.

Список литературы

Махмудов Х. Ф., Щербаков И. П. Метод фрактолюминесценции и наносекундная динамика импульсов люминесценции, геоматериалов под влиянием ударных волн В книге (сборнике): VII Международная научно-практическая конференция “Инновации и перспективы развития горного машиностроения и электромеханики” IPDME-2020; Санкт-Петербург 23-24 апреля 2020 (840 стр.) страницы: 707-712.

DLVO - КОЛЛОИДЫ В ПУАЗЕЙЛЕВОМ ПОТОКЕ ЖИДКОСТИ.**V. Shikin***ИФТТ РАН, г. Черногловка, Россия, shikin@issp.ac.ru*

Жидкость, в которой взвешено большое количество мелких твердых частиц (сферы радиуса R_0), можно считать пространственно однородной, если речь идет о среде с характерными размерами R , большими по сравнению с R_0 : ($R \gg R_0$). Такая среда обладает эффективной динамической вязкостью η , отличной от вязкости η_0 основной жидкости. Согласно Эйнштейну [1]

$$\eta = \eta_0(1 + 5\psi/3), \quad \psi = n_0 R_0^3 \ll 1 \quad (1)$$

Здесь n_0 - объемная плотность легирующей примеси, R_0 - эффективный радиус отдельной примеси, имеющей сферическую форму.

Результат (1) доступен разным проверкам. Зная, к примеру, расход вязкого раствора Q через трубку радиуса $R \gg R_0$

$$Q = \frac{\pi \Delta P}{8\nu l} R^4, \quad \nu = \frac{\eta}{\rho}, \quad R \gg R_0 \quad (2)$$

и варьируя параметр ψ , можно убедиться в достоверности предсказания (1). Здесь ΔP - перепад давлений на концах трубки, l - ее длина, $\nu = \eta/\rho$ - кинематическая вязкость, ρ - плотность растворителя. При этом выясняется, что условие $R \gg R_0$, необходимо фигурирующее при выводе (1), недостаточно для использования (1) в определении Q (2). Имеются примеры течения вязких суспензий с нарушением закона Пуазейля (2), (1). Одна из таких задач обсуждается в данной заметке.

Речь идет о потоке в металлической трубке DLVO - коллоидного раствора (детали определения DLVO - коллоидов из [2, 3] см. в основном тексте). Такие включения, попадая в канал с большой вероятностью адсорбируются на границе металл-электролит (подробнее см. в основном тексте). К тому же их движение вдоль стенок металлической трубки нельзя считать стоковым (один из результатов данной работы). В результате, содержание формулы (2) существенно модифицируется.

1. Л.Ландау, Е.Лифшиц, "Гидродинамика", Москва, Наука, 1988, 733 стр.
2. Б.Дерягин, Л.Ландау, ЖЭТФ 11, (1941), 802
3. E.Verwey, J.Overbeek, "Theory of the Stability of Lyophobic Colloids" Elsevier, Amsterdam, 1948

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ МАГНИТНОЙ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ МИКРОПРОВОДОВ МЕТОДАМИ СКАНИРУЮЩЕЙ ЗОНДОВОЙ МИКРОСКОПИИ

Аксенов О.И., Фукс А.А., Божко С.И., Аронин А.С.
ИФТТ РАН, г. Черноголовка, Россия, oleg_aksenov@inbox.ru

Аморфные ферромагнитные микропровода – это материалы, обладающие выдающимися магнитомягкими и высокочастотными свойствами, что делает их объектом для активных исследований в течение последних 30 лет [1-3]. Особый интерес представляют исследования магнитной доменной структуры микропроводов. На данный момент предпринимались попытки изучения доменной структуры микропроводов магнитооптическими методами [4], методами зондовой микроскопии и путем моделирования [5]. Исходя из особенностей изготовления микропроводов методом Улитовского-Тейлора установлено, что неоднородное распределение напряжений по сечению провода в совокупности с ненулевой магнитострикцией и магнитостатическим вкладом вызывает формирование в таких объектах композиционной магнитной доменной структуры.

В рамках данной работы были исследованы аморфные микропровода состава $\text{Fe}_{77,5}\text{Si}_{13,5}\text{B}_9$ диаметром 16,5 мкм с предварительно удаленной стеклянной оболочкой. Исследование поверхности и поверхностной магнитной структуры проводилось методом сканирующей зондовой микроскопии. На рис. 1 приведено полученное нами магнитно-силовое изображение поверхностной магнитной доменной структуры аморфных микропроводов состава $\text{Fe}_{77,5}\text{Si}_{13,5}\text{B}_9$.

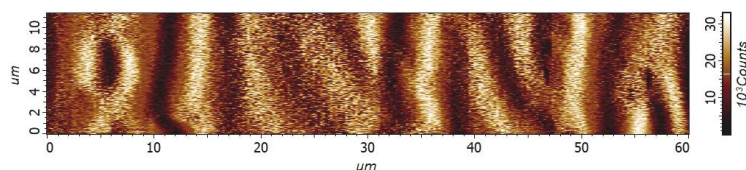


Рис. 1. Магнитно-силовое изображение поверхностной магнитной доменной структуры микропровода

Как видно из рис. 1, доменная структура не является однородной. В ней присутствуют как переходящие доменные прослойки различной толщины, так и уединенные домены шириной до 4 мкм. Результаты исследования поверхностной доменной структуры и доменной структуры поперечного сечения микропроводов в совокупности свидетельствуют в пользу предположения о нарушении цилиндрической симметрии в распределении напряжений в аморфных микропроводах. Это может иметь принципиальное значение при оптимизации эффекта гигантского магнитного импеданса и анализе особенностей перемангничивания микропроводов.

Благодарности.

Работа выполнена в рамках госзадания ИФТТ РАН

1. M. Ipatov, N.A. Usov, A. Zhukov, J. Gonzalez, *Physica B*, **Vol. 403**, 379 (2008)
2. M. Vazquez, G.A. Basheed, G. Infante, R.P. Del Real, *Phys. Rev. Lett.*, **Vol. 108**, 037201 (2012).
3. V. Zhukova, J.M. Blanco, P. Corte-Leon, M. Ipatov, M. Churyukanova, S. Taskaev, A. Zhukov, *Acta Mater.*, **Vol. 155**, 279 (2018).
4. O.I. Aksenov, G.E. Abrosimova, A.S. Aronin, N.N. Orlova, M.N. Churyukanova, V.A. Zhukova, and A.P. Zhukov, *Journal of Applied Physics*, **Vol. 122**, 235103 (2017).
5. D. Chen, J. Liu, L. Zhang, H. Shen, and J. Sun, *Metals*, **Vol. 12**, 1926 (2022).

СЛОИСТЫЕ КОМПОЗИТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ, СФОРМИРОВАННЫЕ КРУЧЕНИЕМ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Пермякова И. Е., Глезер А. М.

ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», Москва, Россия, inga_perm@mail.ru

В работе созданы два типа многослойных композитных материалов, применяя технологию кручения под высоким давлением (КВД), где интенсивная пластическая деформация осуществлялась в камере Бриджмена.

Первый тип аморфно-нанокристаллических композитов (АНК 1) получен при КВД чередующихся слоёв аморфных сплавов разных по химическому составу $\text{Co}_{28.2}\text{Fe}_{38.9}\text{Cr}_{15.4}\text{Si}_{0.3}\text{B}_{17.2}$, $\text{Fe}_{53.3}\text{Ni}_{26.5}\text{B}_{20.2}$. Второй тип (АНК 2) – в ходе частичной аморфизации при КВД наноламинатов «медь-ниобий», сформированных предварительно многократной пакетной прокаткой [1-3].

Выявлен оптимизированный режим обработки КВД, обеспечивающий компромиссный баланс твёрдости и трещиностойкости полученных АНК 1: давление 6 ГПа, скорость вращения подвижной наковальни 1 об/мин и деформация $N = 4-6$ оборотов.

Обнаружен синергичный эффект значений HV для АНК 1: микротвёрдость композита при $N > 4$ превосходит значения HV его отдельных аморфных составляющих, из которых он образован. Установлены три стадии трансформации структурно-фазового состояния АНК 1. При $N = 1-3$ аморфные сплавы деформируются достаточно независимо, обеспечивая лишь механическое «сцепление» слоёв. При $N = 4-5$ происходит межфазное взаимодействие в приграничных областях с образованием боридных фаз, которое ответственно за эффект синергичного упрочнения. Наблюдается частичное вихревое перемешивание, но слоистость структуры всё ещё сохраняются. При $N = 6-9$, переносимые вихревые потоки вещества коагулируют вплоть до полного перемешивания и образования нового гибридного гомогенного многокомпонентного сплава [2].

Методами ПЭМ высокого разрешения и РСА в АНК 2 на основе наноламинатов Cu-Nb после КВД при $N = 4$ обнаружено образование областей с аморфной структурой, непосредственно связанных с межфазными границами. Установлено трехкратное увеличение микротвёрдости нанокompозитов Cu/Nb в процессе КВД. Обнаружен двухстадийный переход от анизотропии микротвёрдости в исходном состоянии к изотропии HV при $N = 4$ [3].

Литература

1. Permyakova I., Glezer A. Amorphous-nanocrystalline composites prepared by high-pressure torsion // *Metals*. 2020. V. 10. N 4. Art. No. 511. P. 1-19.
2. Permyakova I.E., Glezer A.M., Kovalev A.I., Vakhrushev V.O. Three-stage evolution of the structure and the effect of non-additive hardening of layered composites of amorphous alloys at high-pressure torsion // *JETP Letters*. 2021. V. 113. N 7. P. 471-476.
3. Permyakova I.E., Glezer A.M., Karpov M.I., Vnukov V.I., Shtansky D.V., Gorshenkov M.V., Shchetinin I.V. Structural amorphization and mechanical properties of nanolaminates of the cooper-niobium system during high-pressure torsion // *Russian Physics Journal*. 2018. V. 61. N 3. P. 428-438.

ОБРАЗОВАНИЕ АЛМАЗОВ НА ВОЗДУХЕ ПРИ КОМНАТНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ В ПСЕВДОГРАФИТОВЫХ CVD ПЛЕНКАХ

Иван Шмытко, Олег Мисочко и **Сергей Брантов**

Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Московская обл., 142432, Россия. E-mail: shim@issp.ac.ru

Методами XRD, SEM and KR спектроскопии исследованы структурные изменения в нанокристаллических пленках псевдо графита, полученных методом CVD (chemical vapor deposition) при пиролизе метана при температуре ~ 1270 - 1420 К и сконденсированных под действием электрического поля напряженностью $\sim 10^{-2}$ В/ $\mu\text{м}$ на подложки монокристаллического кремния, [1]. Полученные пленки толщиной ~ 10 - 15 мкм и коэффициентом графитизации, равным ≈ 0.44 , перед исследованием были выдержаны в течение ~ 2 -х лет в обычной атмосфере при комнатной температуре. Вследствие взаимодействия таких пленок с атмосферой в них произошли кардинальные структурные изменения. Необычным результатом такого взаимодействия оказался рост микро кристаллитов алмаза высокого совершенства (см. рис.1 и рис.2 и рис.3), существенное изменение состава оставшейся матрицы и исчезновение структуры псевдо графита.

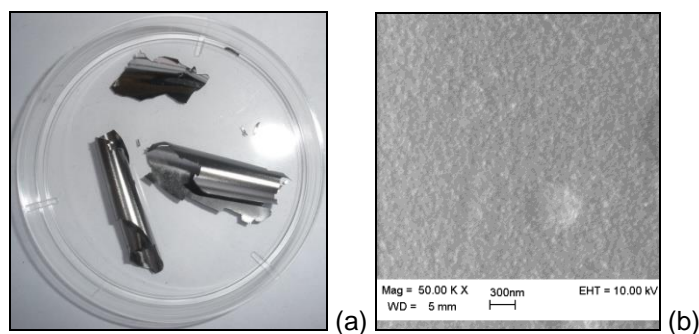


Рис.1. (a) - фото нескольких “as grown” пленок, полученных CVD (chemical vapor deposition) методом; (b) - SEM-изображение такой “as grown” пленки.

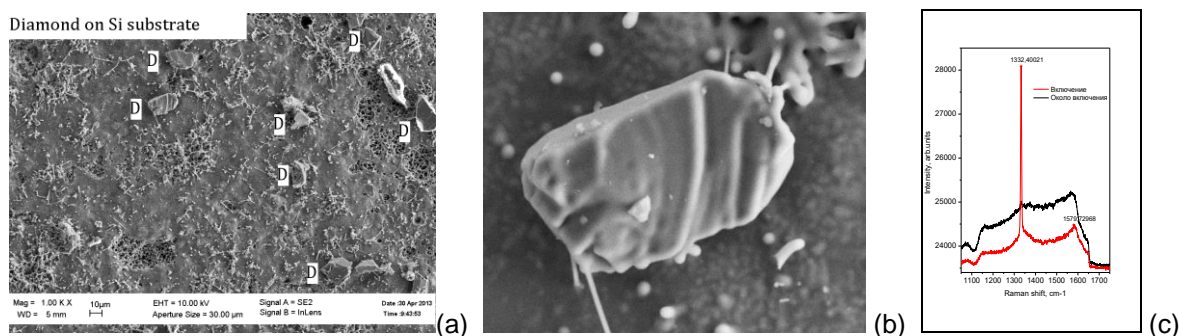


Рис.2. (a) - SEM-изображение пленки на подложке по истечении 2-2.5 лет; (b) - SEM-изображение отдельного микро кристаллита алмаза; (c) - пример КР спектра кристаллита D на рис. 2(a).

[1] Брантов. S и др. (2013) Письма по технической физике 39, 108-111.

КВАНТОВЫЙ РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ БЛОХОВСКИХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ЭЛЕКТРОНОВ СВЕРХВЫСОКОЙ ЭНЕРГИИ В ТОНКОЙ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКЕ

С.М. Шкорняков*

ФНИЦ «Кристаллография и фотоника», Институт кристаллографии им.

А.В.Шубникова РАН, 119333 Москва, Россия

*E-mail: shkorniyakov@mail.ru

Произведен расчет коэффициента отражения электронов, падающих нормально на тонкую монокристаллическую пленку. Показано, что и при сверхвысоких энергиях частиц (порядка 1 МэВ) заметно проявляется квантовый размерный эффект (рис.1)

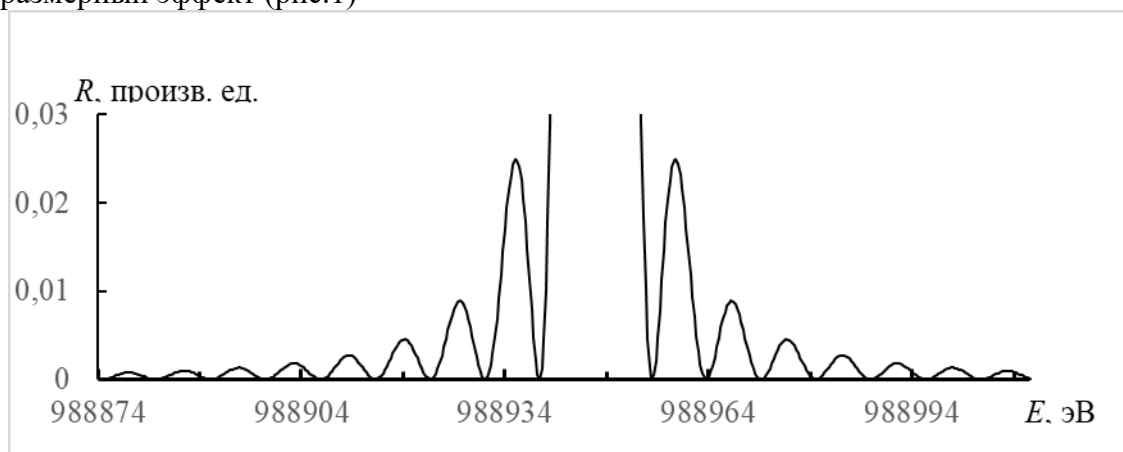


Рис.1 График зависимости коэффициента отражения R от энергии падающих электронов E в диапазоне энергий около 1 МэВ.

Ранее этот факт не был известен. Считалось, что эффект наблюдаем только для электронов низкой энергии и его действительно наблюдали в туннельных экспериментах, где это требование выполняется. В монокристаллической же пленке формируются блоховские волны, длина которых изменяется от периода одномерной решетки и до толщины пленки. Это существенно ослабляет требования к объекту исследования и делает принципиально возможным наблюдение эффекта. Также следует отметить, что ранее при построении теории дифракции электронов средней и высокой энергии от монокристаллических пленок, не учитывалось отражение от второй границы пленки (считалось, что оно мало и им пренебрегали). Учет же его приводит к возникновению квантового размерного эффекта при рассеянии электронов на пленке [1]. Два последних фактора, на которые впервые обратил внимание автор, ранее не учитывались ни в теоретических моделях эффекта, ни при экспериментальном его исследовании. Кроме того показано, что на кривой отражения присутствуют брэгговские пики. Произведена оценка расстояния между ними и их интенсивности.

1. Шкорняков С.М. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2022. №8. С. 102. DOI: 10.31857/S1028096022080143

ПОЛИМОРФНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ДИОКСИДЕ КРЕМНИЯ

А.И. Непомнящих

Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, Иркутск, Россия

e-mail: ainep@igc.irk.ru

Особо-чистый природный кварц имеет широкое промышленное применение. Диоксид кремния, благодаря своим свойствам, широкой области прозрачности от вакуумного ультрафиолета до ИК области, термостойкости, низкий коэффициент температурного расширения, получил широкое промышленное применение в качестве оптического материала, термостойкой кварцевой керамики и других применений. Он является исходным материалом для получения кварцевых концентратов высокой и ультравысокой степени чистоты. На основе кварцевых концентратов производится оптическое кварцевое стекло для видимой и ближней инфракрасной областей спектра, а также термостойкая кварцевая керамика самого широкого применения, включая радиопрозрачные обтекатели ракет. Наибольшие объемы кварцевых концентратов используются для изготовления большеразмерных тиглей из кварцевого стекла для выращивания монокристаллического кремния большого диаметра методом Чохральского и тиглей из кварцевой керамики для получения мульткристаллического кремния.

Полиморфные превращения кварц-кristобалит, а также температура и кинетика кристаллизации стекла во многом определяют особенности процессов обогащения кварцевого сырья и получения кварцевых концентратов. Институтом геохимии СО РАН выявлен и достаточно детально изучен новый тип особо-чистого кварцевого сырья – высокочистые кварциты Восточного Саяна [1-6]. На базе этого сырья получены кварцевые концентраты высокой степени чистоты и «сухое» кварцевое стекло марки КИ.

Доклад посвящен рассмотрению особенностей полиморфных превращений в природном кварцевом сырье различного генезиса и процессов кристаллизации в кварцевом стекле.

1. Е.И. Воробьев, А.М. Спиридонов, А.И. Непомнящих, М.И. Кузьмин. Сверхчистые кварциты Восточного Саяна (Республика Бурятия, Россия) // ДАН. 2003, т. 390, № 2, с. 219-223.
2. А.И. Непомнящих, А.М. Федоров, А.П. Жабоедов, М.Г. Волкова. Высокочистые кварциты Восточного Саяна // Геология и геофизика, 2023, в печати.
3. А.М. Федоров, В.А. Макрыгина, А.Е. Будяк, А.И. Непомнящих. Новые данные о геохимии и механизме формирования кварцитов месторождения Бурал-Сарьдаг (Восточный Саян) // ДАН. 2012, т. 442, № 2, с. 244-249.
4. Непомнящих А.И., Волкова М.Г., Жабоедов А.П., Лесников А.К., Лесников П.А., Паклин А.С., Сизова Т.Ю., Спиридонов А.М., Федоров А.М., Шалаев А.А., Шендрик Р.Ю. Оптическое стекло из кварцитов Восточного Саяна // Физика и химия стекла. 2018, т.44, № 2, стр. 169-177.
5. А. И. Непомнящих, М. Г. Волкова, А. П. Жабоедов, А. М. Федоров. Кварцевые концентраты на основе сливного кварцита // Неорганические материалы. 2018, том 54, № 8, с. 850–853.
6. Д.Ц. Ауржанаева, А.М. Федоров, А.М. Мазукабзов, А.И. Непомнящих, Э.А. Очирова, В.Ф. Посохов. Механизмы формирования химически чистых кварцитов Бурал-Сардыкского месторождения // Геология и геофизика, 2020, N 10, стр. 1316-1330.

ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ И ПЛОСКОСТНОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК ВИСМУТА

Гергега В. А., Суслов А. В., Грабов В. М., Комаров В. А., Колобов А. В.
РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия, gerega.vasilisa96@gmail.com

Исследование влияния плоскостной деформации на транспортные свойства ультратонких пленок висмута может позволить более глубоко проанализировать эффект конкуренции в них перехода полуметалл-полупроводник и металлических поверхностных состояний [1]. В экспериментальных исследованиях продемонстрирована зависимость транспортных свойств пленок висмута толщиной более 100 нм от деформации [2]. Кроме того, с помощью расчетов из первых принципов показано, что при экспериментально достижимых одноосных деформациях растяжения и сжатия кристалла висмута возможны переход из тривиального в топологическое состояние и переход полуметалл-полупроводник [3].

В работе представлены результаты исследования электрических и гальваномагнитных свойств тонких пленок висмута (10–1250 нм) на подложках из оксидированного кремния, слюды и CaF_2 . Пленки висмута находятся в состоянии плоскостного сжатия или растяжения, если коэффициенты температурного растяжения (КТР) материалов подложки и пленки различаются [2]. КТР выбранных подложек обеспечивает создание в образцах как растяжения в плоскости, так и сжатия. Показано, что у пленок на всех типах подложек кристаллографическая ориентация одинакова. Транспортные свойства пленок измерялись при постоянном токе и магнитном поле до 0.7 Тл в диапазоне температур 77–300 К. На основе полученных экспериментальных значений компонент тензоров удельного сопротивления, магнетосопротивления и коэффициента Холла рассчитаны концентрация и подвижности носителей заряда. В рамках двухзонного приближения рассчитано изменение положения экстремумов зоны проводимости и валентной зоны в зависимости от деформации и толщины образцов относительно уровня Ферми.

Обнаружено, что в области толщин более 100 нм существует четкая связь между гальваномагнитными свойствами и деформацией, возникающей из-за различия КТР пленки и подложки. В этом диапазоне толщин концентрация носителей заряда возрастает при в плоскости сжатии пленки (CaF_2), а при растяжении — уменьшается (mica, Si). Таким образом, при сжатии пленки в плоскости увеличивается перекрытие актуальных экстремумов, а при растяжении — уменьшается. Однако при уменьшении толщины пленок менее 100 нм транспортные свойства носителей заряда слабо зависят от деформации. Для пленок в диапазоне толщин 10–18 нм на всех типах подложек характерно изменение вида температурной зависимости удельного сопротивления от полупроводникового типа к виду, характерному для металлов. При этом наблюдается значительный рост концентрации носителей заряда, который мало зависит от величины деформации. В рамках двухзонного приближения, это может указывать, как на преимущественный вклад поверхностных состояний в транспортные свойства ультратонких пленок, так и на выход за пределы применимости данной модели, так как это приближение не учитывает вклад экстремума валентной зоны в точке L , где возможно возникновение бесщелевого состояния вследствие квантового размерного эффекта.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00850.

1. S. Xiao, D. Wei, X. Jin (2012) *Phys. Rev. Lett.* 109, 16, 166805.
2. V. Suslov, V. M. Grabov, V. A. Komarov, E. V. Demidov, S. V. Senkevich, M. V. Suslov (2019) *Semiconductors* 53, 5, 611–614.
3. I. Aguilera, C. Friedrich, S. Blügel (2015) *Phys. Rev. B* 91, 12, 125129.

ВЛИЯНИЕ СДВИГОВОЙ ПРОЧНОСТИ ГРАНИЦЫ НА ПРОЧНОСТЬ УГЛЕ-АЛЮМИНИЕВОГО КОМПОЗИТА

Галышев С.Н.

*Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка,
Россия, galyshev@ya.ru*

Прочность волокнистых композитов во многом зависит от механических характеристик волокна и матрицы, однако не менее важным параметром является сдвиговая прочность границы между ними. Особое значение этот параметр имеет в композитах с металлической матрицей, что убедительно продемонстрировано в обзорах [1-3]. Автор [1] выводит уточненное правило смеси для расчёта прочности волокнистых композитов со «слабыми» границами в направлении армирования. В работе уточняется величина прочности волокна внутри композита в соответствии с предпосылкой о том, что в процессе разрушения происходит глобальное распределение нагрузки между всеми необорванными волокнами. На основании этого и экспериментальных данных о по меньшей мере восемнадцати различных композитах автор показывает, что с уменьшением сдвиговой прочности границы происходит уменьшение прочности композита. Это происходит по двум причинам, первая – уменьшение сдвиговой прочности границы увеличивает критическую длину волокна; вторая – в соответствии с распределением Вейбулла, с ростом длины волокна уменьшается его прочность. В обзорах [2] на примере восьми типов композитов с металлической и керамической матрицами, а также в обзоре [3] на примере композита с алюминиевой матрицей, армированной оксидным волокном показано, что «слабая» граница между матрицей и волокном приводит к торможению распространения магистральной трещины в плоскости перпендикулярной армированию, в результате чего прочность композита оказывается существенно выше, чем при «сильной» границе. Таким образом, с одной стороны, согласно [1], уменьшение сдвиговой сокращает прочность композита, а с другой, согласно [2, 3], наоборот. Качественная модель, которая учитывает оба эти фактора описана в работе [4]. Согласно этой модели, наибольшая прочность композита достигается при критической величине сдвиговой прочности между матрицей и волокном. При этом, в случае если сдвиговая прочность границы меньше критического значения, прочность композита определяется в соответствии с уточненным правилом смеси [1]. В противном случае прочность определяется критическим напряжением распространения трещины.

В докладе представлена оценка зависимости прочности композита от сдвиговой прочностью границы на основе экспериментальных данных, уточненного правила смеси, в соответствии с распределением Вейбулла, и оценки критического напряжения распространения трещины, в соответствии с концепцией Гриффитса-Орована-Ирвина.

Работа выполнена при поддержке РФФ №22-79-10064

1. W.A. Curtin, Ultimate strengths of fibre reinforced ceramics and metals // Composites. 1993. № 24(2). С. 98-102
2. A. G. Evans. The mechanical properties of reinforced ceramic, metal and intermetallic matrix composites // Materials Science and Engineering: A. 1991. №143(1-2). С. 63–76
3. H. E. Deve, C. McCullough. Continuous-fiber reinforced composites: A new generation. // The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society. 1995. №47(7). С. 33–37
4. S. Galyshev, V. Orlov, B. Atanov, E. Kolyvanov, O. Averichev, T. Akopdzhanyan. The Effect of Tin Content on the Strength of a Carbon Fiber/Al-Sn-Matrix Composite Wire // Metals. 2021. №11(12). С. 2057(1-11)

ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ МОДЕЛИ ПОТТСА

Мазагаева М.К., Муртазаев А.К., Магомедов М.А., Рамазанов Р.М.
Институт физики ДФИЦ РАН, Россия, Махачкала, mazagaeva86@mail.ru

Для исследования фазовых переходов (ФП), магнитных, термодинамических и критических свойств магнитных материалов в современной физике конденсированных сред используются различные решеточные модели. С помощью теоретических методов на простых решеточных моделях удается решить большое количество задач, имеющих широкие перспективы для практического применения. Для изучения физических свойств магнитных материалов широко используют модели Изинга, ХУ, Гейзенберга, Поттса и др. Эти модели также описывают большой класс реальных физических систем: слоистые магнетики, пленки жидкого гелия, сверхпроводящие пленки, адсорбированные пленки и др. [1]. В последние годы, с использованием этих моделей успешно изучаются различные магнитные спиновые системы.

В данной работе нами изучается влияние внешнего магнитного поля на характер ФП, магнитные и термодинамические свойства двумерной модели Поттса с числом состояний спина $q = 4$ на гексагональной решетке с учетом обменных взаимодействий ближайших и вторых за ближайшими соседями методом Монте-Карло.

Гамильтониан этой модели имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
 H &= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} S_i S_k - h \sum_{\langle i \rangle} S_i = \\
 &= -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle, i \neq j} \cos \theta_{i,j} - J_2 \sum_{\langle i,k \rangle, i \neq k} \cos \theta_{i,k} - h \sum_{\langle i \rangle} S_i,
 \end{aligned} \tag{1}$$

где J_1 и J_2 – параметры обменных ферро- ($J_1 > 0$) и антиферромагнитного ($J_2 < 0$) взаимодействия соответственно для ближайших и следующих за ближайшими соседями, $\theta_{i,j}$, $\theta_{i,k}$ – углы между взаимодействующими спинами $S_i - S_j$ и $S_i - S_k$, h – величина магнитного поля (h приводится в единицах J_1). В данном исследовании рассматривается случай, когда $|J_1| = |J_2| = 1$. Величина внешнего магнитного поля менялась в интервале $0.0 \leq h \leq 7.0$ с шагом 1.0.

Получены магнитные структуры основного состояния в широком интервале значений поля. Обнаружено, что в зависимости от величины магнитного поля в данной модели наблюдаются димерная, частично упорядоченная и страйповая магнитные структуры. На основе гистограммного метода проведен анализ характера ФП. Показано, что в интервале значений магнитного поля $0.0 \leq h \leq 3.0$ переход из упорядоченной и частично упорядоченной фаз в полностью разупорядоченную (парамагнитную) фазу является ФП первого рода. Обнаружено, что в сильных полях $h \geq 4.0$ магнитное поле снимается вырождение основного состояния и фазовый переход в системе подавляется.

Литература

1. Diep Н.Т. Frustrated Spin Systems, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2004).
2. Domanу E., Schick M., Walker J.S. // Phys. Rev. Lett. 1977. V. 38. P. 1148.
3. Муртазаев А.К., Рамазанов М.К., Мазагаева М.К., Магомедов М.А. ЖЭТФ. 2019. Т. 156. С. 502.

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ КИНЕТИКИ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ В ГЕТЕРОФАЗНЫХ ПЛЕНКАХ Co/Pt/Co

Горнаков В.С., Шашков И.В., Кабанов Ю.П.

Институт Физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия,
gornakov@issp.ac.ru

Исследована кинетика преобразования доменной структуры в тонкоплёночной сверхрешётке с перпендикулярной магнитной анизотропией (ПМА), в которой ультратонкие ферромагнитные (ФМ) слои Co разделены немагнитной (НМ) прослойкой Pt (Рис.1а). В таких наномангнетиках существенное влияние на преобразование, динамические параметры и релаксацию доменной структуры оказывает обменное взаимодействие между ФМ слоями [1], которое определяется толщиной НМ прослойки [1, 2]. С использованием Керр-микроскопии изучено влияние толщины немагнитной прослойки и температуры на величину межслоевой обменной связи в ультратонкой гетерофазной структуре Pt(10 нм)/Co(0,6 нм)/Pt(t)/Co(0,6 нм)/Pt(3 нм). Эта структура была нанесена магнетронным распылением на окисленную кремниевую подложку площадью 5x6 мм² при комнатной температуре. Толщина прослойки платины t равномерно изменялась от 5 нм до 6 нм (Рис.1а). Формирование и эволюция доменов были изучены с помощью магнитооптического эффекта Керра (Рис.1б).

Исследовано смещение доменных границ (ДГ) в диапазоне температур от 200К до 300К. Показано, что независимое смещение ДГ в слоях в перпендикулярном магнитном поле происходит в диапазоне толщин $t_{CR} < t < t_0$. Установлена нелинейная зависимость этого смещения от величины внешнего магнитного поля в этой области толщин (Рис.2). Показано, что равновесное положение ДГ достигается в зависимости от величины поля, толщины немагнитной прослойки и температуры $x(H, t, T)$. Величина x определяется балансом сил, действующих на ДГ. Рассмотрен механизм стабилизации доменных границ вблизи $t=t_{CR}$ при независимом движении границ в слоях. Получена зависимость энергии межслоевой обменной связи $J(t, H)$ от толщины немагнитной прослойки во всем диапазоне температур.

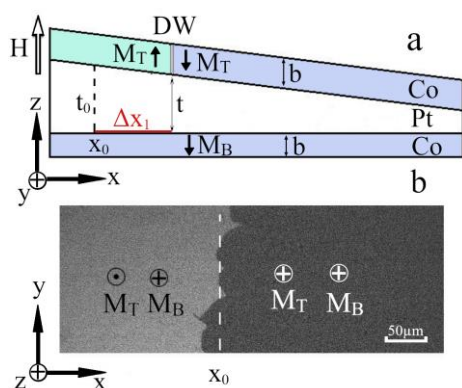


Рис.1 Схематическое (а) и магнитооптическое (б) изображения доменной структуры в образце Co/Pt/Co.

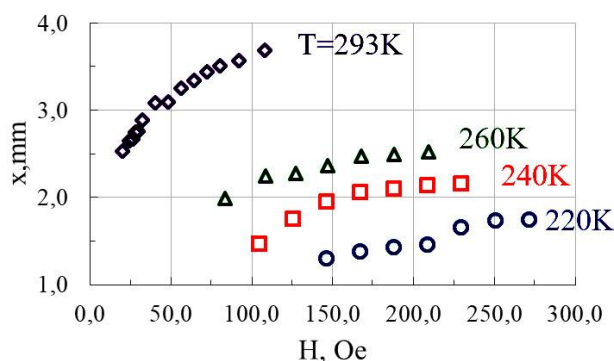


Рис.2 Зависимость смещения доменной границы от величины магнитного поля при различных температурах.

Литература

1. Omelchenko P., Montoya E., Girt E., Heinrich B.// J. Exp. Theor. Phys. – 2020. – №131. – P. 113–129.
2. Shashkov I.V., Kabanov Yu.P., Tikhomirov O.A., and Gornakov V.S.// Magnetism. – 2022. – № 2. – P. 186–194.

ПОДАВЛЕНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ОМЕГА ФАЗЫ В ПРОЦЕССЕ КВД В СПЛАВАХ Ti-V С УВЕЛИЧЕНИЕМ ДОЛИ ВАНАДИЯ

Давдян Г.С.^{1,2}, Страумал Б.Б.^{1,2}, Афоникова Н.С.², Тюрин А.И.³,
Дружинин А.В.², Горнакова А.С.²

¹НИТУ «МИСиС», г. Москва, 119049 Россия

²ИФТТ РАН, г. Черноголовка, 142432 Россия

³НИИ «НТ и НМ» ТГУ им. Г.Р. Державина, г. Тамбов, 392000 Россия

E-mail: faberest@yandex.ru

Одним из методов изменения свойств титановых сплавов является интенсивная пластическая деформация (ИПД), одним из часто используемых методов которой является кручение под высоким давлением (КВД). КВД воздействуют на сплав так, как будто сплав прошёл отжиг при повышенной температуре и закалку [1]. В результате измельчаются зёрна и происходят фазовые превращения [2]. Также в сплавах образуются различные дефекты, однако их объём увеличивается до определённого уровня, после достижения которого образование дефектов и релаксация уравнивают систему [3]. В нашей работе мы исследовали как обработка КВД изменит фазовый состав, твёрдость (H) и модуль Юнга (E) в сплавах Ti-V с концентрацией ванадия от 2 до 8 вес. %. Предварительно все исследуемые образцы были отожжены при 1000 °С в β -области фазовой диаграммы Ti-V.

После КВД во всех сплавах образуются ω Ti и β Ti-фазы. Также остаётся доля α Ti-фазы, объёмом 15–22 %. Образованная доля ω Ti-фазы уменьшается в сплавах с более высокой концентрацией ванадия, с 76 до 49 %. В то время как доля β Ti-фазы увеличивается, с 9 до 36 %. Очевидно, что ванадий, имеющий в нормальном состоянии ОЦК решётку, смещает фазовое равновесие системы в сторону β Ti-фазы, также обладающей ОЦК решёткой. Тем самым показано, что КВД определённых составов титановых сплавов может способствовать образованию β Ti-фазы.

Во всех сплавах обработка КВД привела к увеличению значений твёрдости. Максимальная разница между отожжённым и крученным сплавом приходится на сплав Ti-2 вес.%V и составляет 2.25 ГПа, при этом в обработанном КВД сплаве с 2 % ванадия достигается наибольшее численное значение твёрдости 6.36 ГПа. Модуль Юнга после обработки также увеличивается, на 25–40 ГПа. Исследуемые механические свойства обработанных КВД сплавов однородны вдоль диаметров образцов.

КВД обработка привела к повышению твердости и модуля Юнга всех сплавов. Исходя из сравнительного анализа можно сказать, что ω Ti фаза обладает наибольшими значениями модуля Юнга, так как ее уменьшение, с повышением концентрации ванадия, привело к уменьшению средних значений модуля Юнга.

Работа частично была выполнена в рамках госзадания ИФТТ РАН

1. X. Sauvage, A. Chbihi, X. Quelennec, J. Phys. 240, 012003 (2010).
2. B. Straumal, A. Korneva, P. Zięba, Arch. Civ. Mech. Eng. 14, 242 (2014).
3. A.A. Mazilkin, B.B. Straumal, S.G. Protasova, O.A. Kogtenkova, R.Z. Valiev, Phys. Solid State 49, 868 (2007).

ДВУХСЛОЙНЫЕ И ОДНОСЛОЙНЫЕ СОСТОЯНИЯ КВАНТОВОГО ЭФФЕКТА ХОЛЛА В ШИРОКИХ КВАНТОВЫХ ЯМАХ

Дорожкин С. И., Капустин А. А., Федоров И. Б.

*Институт физики твердого тела РАН им. Ю.А. Осипьяна, Черноголовка, Россия,
dorozh@issp.ac.ru*

Исследованы электронные системы, возникающие в полевых транзисторах на основе гетероструктур GaAs/AlGaAs специальной архитектуры, в которых проводящий канал создается в широкой (60 нм) квантовой яме GaAs, помещенной между двумя параллельными ей затворами. В такой системе в зависимости от комбинаций затворных напряжений в нулевом магнитном поле возможно существование либо одной, либо двух двумерных электронных систем (ДЭС), расположенных в последнем случае около противоположных стенок квантовой ямы. В общем случае плотности электронов в этих ДЭС различны. Разработанная авторами оригинальная емкостная методика [1] позволяет характеризовать сжимаемость каждого из двух слоев (или одного слоя в случае однослойной системы), и таким образом регистрировать возникновение несжимаемых состояний в квантующих магнитных полях в каждой из двух ДЭС и определять плотности электронов в них. Эта же методика позволяет отличать двухслойные состояния системы от однослойных.

Оказалось, что двухслойная в нулевом поле, электронная система трансформируется в однослойное состояние в квантующем магнитном поле на факторах заполнения спиновых подуровней Ландау единица и двойка *всеми электронами системы* [2]. В этих состояниях система является несжимаемой и реализует состояния целочисленного квантового эффекта Холла (КЭХ) с соответствующими квантовыми числами. Вне этих факторов заполнения электронная система опять становится двухслойной, свидетельством чего является наблюдение несжимаемых состояний только в одном из слоев. Наблюдаемая картина не зависит от распределения плотности электронов между двумя слоями в нулевом поле.

Измерения, выполненные в наклонном магнитном поле, привели к обнаружению необычных комбинированных состояний дробного КЭХ. Наблюдены дробные состояния при значениях полных факторов заполнения ν_t как с нечетными: $\nu_t=4/3, 10/7, 6/5$, так и с четными: $\nu_t=5/4$ знаменателями [3]. Установлено, что эти состояния являются комбинированными состояниями КЭХ, соответствующими фактору заполнения $\nu_{>}=1$ в слое с большей плотностью электронов. При разном соотношении плотностей в слоях, в одной развертке магнитного поля удается наблюдать различные пары состояний дробного КЭХ, что свидетельствует о перераспределении электронов между слоями при изменении поля. Причиной возникновения необычных состояний дробного КЭХ предположительно является особенность исследованных систем, когда ближайшими соседями электронов слоя меньшей плотности являются электроны другого слоя.

Литература

1. Dorozhkin S.I., Kapustin A.A., Fedorov I.B., Umansky V., von Klitzing K., Smet J.H. // Journ. of Appl. Phys. – 2018. – Т. 123. С. – 084301 1-5.
2. Dorozhkin S.I., Kapustin A.A., Fedorov I.B., Umansky V., Smet J.H. // Phys. Rev. B. – 2020. – Т. 102. С. – 235307 1-6.
3. Дорожкин С.И., Капустин А.А., Федоров И.Б., Уманский В., Смет Ю.Х. // Письма в ЖЭТФ – 2023. – Т. 117. – № 1. – С. 72-79.

СТРУКТУРА И ПРОЧНОСТЬ ОКСИДНЫХ $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ ВОЛОКОН, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ СТЕПАНОВА

Кийко В.М., Стрюков Д.О.

Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка Московской обл., Россия,

kiiko@issp.ac.ru

Высокая прочность, сохраняющаяся вплоть до температур плавления, повышенная трещиностойкость (до $5 \text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$) в сравнении с однородными оксидами (до $2 \text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$), нехрупкое разрушение за счет появления зоны пластичности при малых скоростях нагружения и высоких температурах, а также за счет неоднородности структур, высокое сопротивление ползучести, а также жаростойкость, структурная стабильность и набор различных физико-химических характеристик в зависимости от составов эвтектик, полученных на основе различных оксидов, прежде всего оксида алюминия и сложных оксидов редкоземельных элементов, предопределяет широкий фронт исследований в этой области. На рис. 1а представлена структура в поперечном сечении одного из таких волокон (эвтектика $\text{Al}_2\text{O}_3\text{--Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$). Разноуровневая неоднородность колонийного типа обеспечивает повышенную трещиностойкость волокна, а измельченная структура по периметру – имеет повышенную прочность. Решетки контактирующих фаз когерентны, фазы различаются на ведущую и ведомую, а средние размеры микроструктур зависят от скорости кристаллизации при выращивании волокон указанным методом и соответствуют модели кристаллизации эвтектик Ханта-Джексона.

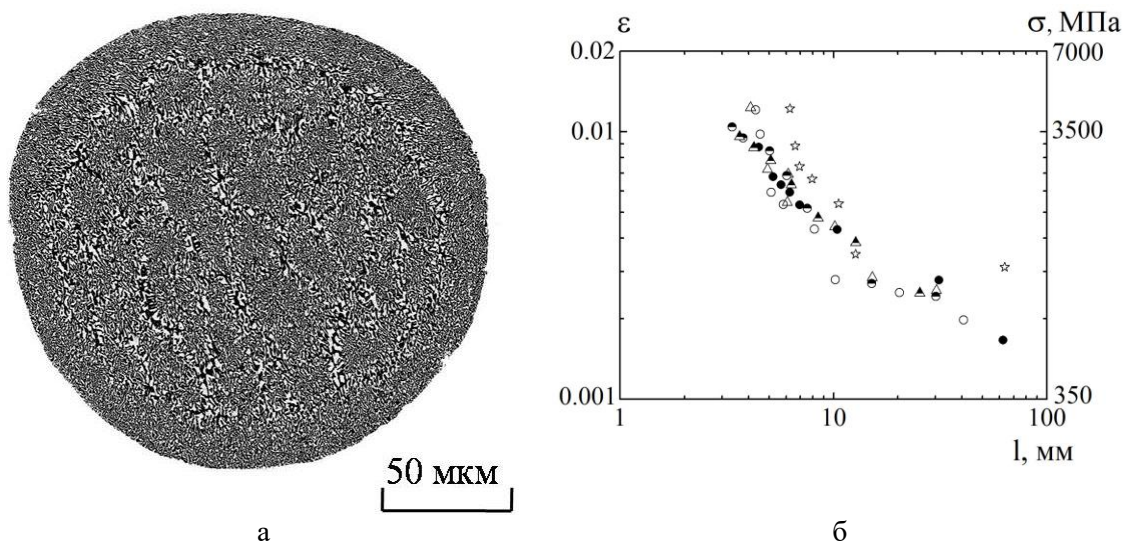


Рис. 1. Поперечное сечение волокна (а), Al_2O_3 – черного цвета, $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ – светлого; (б) – результаты испытаний волокон на прочность, ε – предельная деформация, σ – прочность, l – длина волокна, различные волокна обозначены различными значками.

На рис. 1б показаны зависимости предельной деформации ε и прочности σ волокон от длины l в логарифмических координатах. Волокна испытаны при комнатной температуре в условиях изгиба.

ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУР ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФРУСТРИРОВАННОЙ МОДЕЛИ ИЗИНГА С МАГНИТНЫМ ПОЛЕМ.

Муртазаев К.Ш., Муртазаев А.К., Магомедов М.А., Рамазанов М.К.

Институт физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, 367015 Махачкала, Россия, E-mail: 5kurban@mail.ru

Аннотация. Выявлены структуры основного состояния антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей в магнитном поле. Численный расчет проведен на основе репличного обменного алгоритма метода Монте-Карло. Получены температурные и полевые зависимости термодинамических и магнитных параметров. Построена фазовая диаграмма зависимости критической температуры от величины внешнего магнитного поля. Также определен род фазового перехода для различных значений магнитных полей.

Введение. Системы с конкурирующими обменными взаимодействиями находят большой интерес в области физики конденсированного состояния. Наличие в системе конкурирующих взаимодействий кардинально меняет магнитные и термодинамические свойства аналогичной системы без конкурирующих взаимодействий [1,2]. Также на свойства магнитных решеточных систем с конкурирующими взаимодействиями решающее влияние оказывают внешние факторы: дефекты и деформации, тепловые и квантовые флуктуации, анизотропия и магнитные поля [3].

Модель и метод исследования. Гамильтониан антиферромагнитной модели Изинга с учетом взаимодействия первых и вторых ближайших соседей и магнитного поля можно записать в следующем виде:

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j - J_2 \sum_{\langle\langle i,l \rangle\rangle} S_i \cdot S_l - h \sum_i S_i$$

где $S_{i,j,l} = \pm 1$ – изинговский спин, J_1 и J_2 – константы обменного взаимодействия первых и вторых ближайших соседей, h – величина магнитного поля (приводится в единицах $|J_1|$). Магнитное поле менялось в интервале $0.0 \leq h \leq 18.0$. В данной работе $J_2 = J_1 = -1.0$. В системе сосуществуют 4 подрешетки.

Заключение. Определены структуры основного состояния для антиферромагнитной модели Изинга на объемно-центрированной кубической решетке с конкурирующими обменными взаимодействиями для различных значений магнитных полей. Построены полевые зависимости намагниченности, минимальной энергии и температурные зависимости теплоемкости, намагниченности и восприимчивости.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 20-32-90079 – аспиранты. Также работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС»

Литература

1. Dotsenko V.S. Physics of the spin-glass state // Phys. Usp. 36 (1993) 455–485.
2. Korshunov S.E. Phase transitions in two-dimensional systems with continuous degeneracy, Phys. Usp. 49 (2006) 225–262.
3. Murtazaev K. Sh, Magomedov M.A., Murtazaev A.K., Ramazanov M.K. Phase diagram of the antiferromagnetic Ising model on a body-centered cubic lattice with competing exchange interactions under a magnetic field // Physica E 148 (2023) 115646.

СТРУКТУРНЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В $\text{Eu}_{1-x}\text{La}_x\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ ($x=0, 0.17$)Смирнова Е. С.¹, Сидорова Е. В.¹, Сорокин Т. А.¹, Артемов В. В.¹,
Фролов К. В.¹, Алексеева О. А.¹¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия, esmi@ns.crys.ras.ru

Кристаллы $\text{Eu}_{1-x}\text{La}_x\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ принадлежат семейству соединений редкоземельных ферроборатов, обладающих мультиферроидными свойствами. Замещение катионов в ряду твердых растворов $R_{1-x}R'_x\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ приводит к изменению температуры структурного фазового перехода $R32 \rightarrow P3_121$, что может быть использовано при создании оптических запоминающих устройств и переключателей [1].

В настоящей работе методом рентгеноструктурного анализа исследованы особенности строения монокристаллов $\text{Eu}_{1-x}\text{La}_x\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ ($x=0, 0.17$), выращенных методом из раствора в расплаве [2, 3]. Структуры уточнены при 293 К в пр. гр. $R32$ до значений факторов расходимости $R=0.90\text{--}1.03\%$. В обеих структурах выявлены увеличенные параметры атомных смещений U_{eq} атомов кислорода $\text{O}_2(9e)$.

Параметры элементарной ячейки монокристаллов $\text{Eu}_{1-x}\text{La}_x\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ ($x=0, 0.17$) измерены в диапазоне 25–500 К. Вхождение атомов лантана в структуру приводит к увеличению параметров ячейки. Для обоих кристаллов наблюдается увеличение параметра элементарной ячейки c ниже 100 К, обнаруженное ранее в ряде соединений редкоземельных ферроборатов. Структура $\text{Eu}_{0.83}\text{La}_{0.17}\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ при 25–500 К и $\text{EuFe}_3(\text{BO}_3)_4$ при 89–430 К принадлежит тригональной пространственной группе $R32$. Ниже $T_s = 89$ К в $\text{EuFe}_3(\text{BO}_3)_4$ обнаружен незавершенный структурный фазовый переход из пр.гр. $R32$ в пр.гр. $P3_121$.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-22-00286).

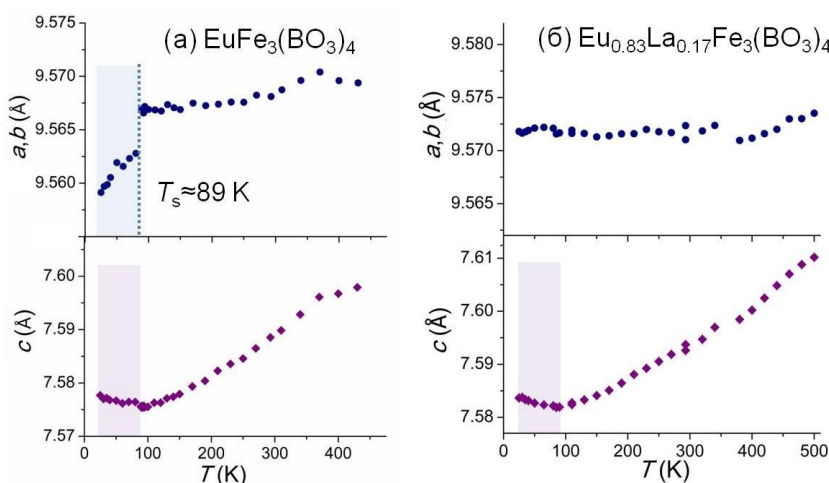


Рис. 1. Зависимость параметров элементарной ячейки монокристаллов $\text{EuFe}_3(\text{BO}_3)_4$ (а) и $\text{Eu}_{0.83}\text{La}_{0.17}\text{Fe}_3(\text{BO}_3)_4$ (б) от температуры.

Литература

1. Boldyrev K.N., Burlakov V.M., Gudim I.A., Gavrilkin S.Yu., Popova M.N. // Phys. Rev. Mater. – 2021. – V. 5. – P. 094414.
2. Gudim I.A., Eremin E.V., Temerov V.L. // J. Cryst. Growth. – 2010. – V. 312. – P. 2427–2430.
3. Popova M.N., Malkin B.Z., Boldyrev K.N., Stanislavchuk T.N., Erofeev D.A., Temerov V.L., Gudim I.A. // Phys. Rev. B. – 2016. – V. 94. – P. 184418.

ИЗМЕНЕНИЯ В СТРУКТУРЕ И ЛОКАЛЬНОМ ОКРУЖЕНИИ ИОНОВ Fe В ЗАМЕЩЕННОМ ФЕРРИТЕ $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{FeO}_{3-\gamma}$ ПРИ ВАКУУМНОМ ОТЖИГЕ

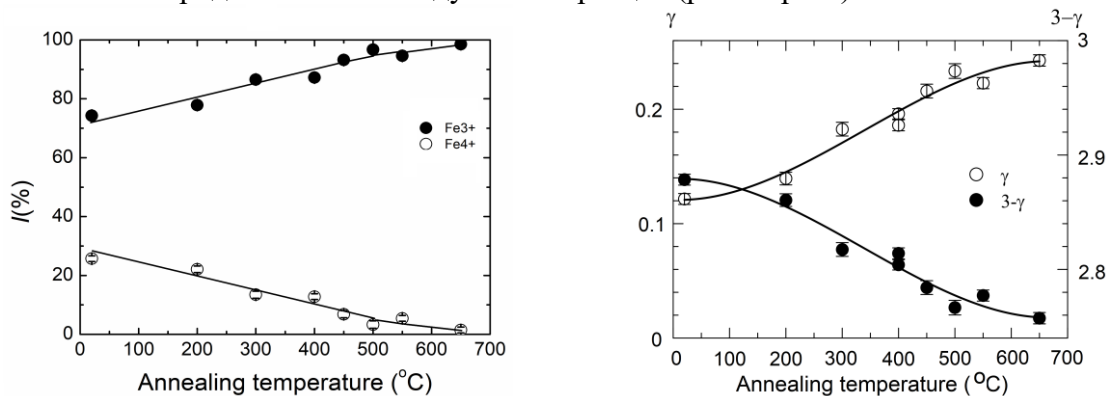
Седых В. Д.¹, Русаков В. С.², Рыбченко О. Г.^{1,3}, Кулаков В. И.¹

¹ИФТТ им. Ю.А. Осипьяна РАН, Черноголовка, Россия, sedykh@issp.ac.ru

²МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

³Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва, Россия

Методами рентгендифракционного анализа и мессбауэровской спектроскопии в смешанном ортоферрите $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{FeO}_{3-\gamma}$ исследованы изменения в структуре и валентных состояниях железа и его ближайшего кислородного окружения, происходящие при вакуумном отжиге в интервале температур 200 – 650°C. Исходный образец $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{FeO}_{3-\gamma}$ синтезирован на воздухе золь-гель методом при 1100°C. Показано, что образцы как исходного феррита, так и отожженного при различных температурах ниже 650°C имеют ромбоэдрическую структуру ($R\bar{3}c$). Вакуумный отжиг приводит к монотонному уменьшению ромбоэдрического искажения решетки и окончательному переходу ее в кубическую ($Pm\bar{3}m$) в результате отжига при 650°C. В исходном феррите, парамагнетике, ионы Fe при комнатной температуре имеют усредненное валентное состояние между Fe^{3+} и Fe^{4+} , которое исчезает при охлаждении образца до 85 К, когда четко детектируются ионы Fe^{3+} и Fe^{4+} . С ростом температуры вакуумного отжига уменьшается до полного исчезновения количество ионов Fe^{4+} (рис. слева) и растет количество кислородных вакансий. Анализ мессбауэровских данных по изменению соотношения валентных состояний ионов Fe и изменению содержания кислородных вакансий с температурой отжига позволил определить количество кислорода во всех исследуемых образцах (рис. справа).



Зависимости от температуры вакуумного отжига относительных интенсивностей мессбауэровских подспектров всех ионов Fe^{3+} и ионов Fe^{4+} (слева), числа кислородных вакансий (γ) и числа ионов кислорода ($3-\gamma$) на формульную единицу феррита $\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{FeO}_{3-\gamma}$ (справа).

В кристаллической решетке при вакуумном отжиге происходит несколько скоррелированных между собой процессов: удаление ионов кислорода с образованием вакансий, изменение валентного состояния ионов железа, перераспределение ионов кислорода по вакантным местам для минимизации искажений решетки. Отжиг при 500 – 650°C, в ходе которых происходит полный переход ионов Fe^{4+} в Fe^{3+} , приводит к заметному уменьшению степени искажения структуры феррита на локальном уровне. Происходит перераспределение интенсивностей мессбауэровских подспектров, отвечающих разным кислородным окружениям ионов Fe, растет доля неискаженных кислородных октаэдров. В целом, этот процесс можно интерпретировать как изменение локального окружения ионов Fe^{3+} в сторону уменьшения его искажения при вакуумном отжиге.

АДСОРБЦИЯ ТИТАНА НА УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ С ДЕФЕКТАМИ**Созыкин С.А., Бескачко В.П.***Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия,
sozykinsa@susu.ru*

Углеродные нанотрубки (УНТ) находят множество применений в электронике [1]. Декорирование УНТ используется для повышения их сорбционной способности как материалов для литиевых батарей [2] или водородных хранилищ [3]. Кроме атомов декора активные центры адсорбции могут возникать и в окрестности структурных дефектов, что приведет к изменению параметров адсорбции атомов декора, попавших на такой центр, как по отношению к декорируемой поверхности, так и по отношению к третьим атомам или молекулам, например к водороду. Помимо изменений в сорбционных свойствах поверхности УНТ присутствие на ней атомов декора и структурных дефектов изменяет и другие свойства. Экспериментально установить особенности адсорбции отдельных атомов на дефектах разного типа – задача нетривиальная и достаточно трудоемкая. На поисковом этапе исследований более эффективным средством ее решения являются методы компьютерного моделирования материалов.

В настоящей работе изучались свойства углеродных нанотрубок, содержащих один из 6 различных видов структурных дефектов: двух дефектов одиночной вакансии, двух дефектов двойной вакансии и двух дефектов изомеризации. В рамках теории функционала электронной плотности (DFT) с помощью программного пакета SIESTA рассчитывалась равновесная структура трубок с дефектами, оценивались энергии образования дефектов, ширина запрещенной зоны и энергия адсорбции атома титана вблизи дефекта и на удалении от него. Для повышения надежности получаемых результатов расчеты проводились в приближениях локальной электронной плотности (LDA) и обобщенных градиентов (GGA). Оказалось, что в рассмотренных случаях оба приближения дают достаточно близкие результаты для ширины запрещенной зоны (отличия для УНТ (11,0) не превышают 3,5 %) и для энергии образования дефекта (для той же трубки отличия не больше 4,5%) независимо от того, присутствует на трубке дефект или нет.

В качестве декора рассматривались атомы титана. Оказалось, что равновесные положения этого атома в окрестности дефектов энергетически более привлекательны, чем таковые положения на поверхности совершенной трубки. В то же время величины энергии связи атома Ti с трубкой, найденные в упомянутых выше приближениях, заметно отличаются - связь в приближении LDA всегда сильнее. Самое сильное связывание было обнаружено для адсорбции титана на нанотрубке с дефектов вакансии: этот случай можно рассматривать как дефект замещения одного атома углерода на атом титана.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Министерства образования и науки Российской Федерации (FENU-2023-0011 (2023011ГЗ)).

Литература

1. Maheswaran, R., Shanmugavel, B.P. // J. Electron. Mater. – 2022. – V. 51. – P. 2786–2800.
2. Zhao X., Wu Y., Wang Y., Wu H., Yang Y., Wang Z., Dai L., Shang Y., Cao A. // Nano Res. – 2020. – V. 13 (4). – P. 1044.
3. Yang L., Yu L.L., Wei H.W., Li W.Q., Zhou X., Tian W.Q. // Int. J. Hydrogen Energy. – 2019. – V. 44. – № 5. – P. 2960–2975.

ФОТОПРОВОДИМОСТЬ В СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ С ИНВЕРСНЫМ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИМ СПЕКТРОМ В СВЧ ДИАПАЗОНЕ

Казakov А.С.¹, Чмырь С.Н.¹, Галеева А.В.¹, Артамкин А.И.¹, Дворецкий С.А.², Михайлов Н.Н.², Банников М.И.³, Данилов С.Д.⁴, Рябова Л.И.⁵, Хохлов Д.Р.^{1,3}

¹ *Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Ленинские горы, 1, стр.2, Москва, 119991, Россия.*

² *Институт физики полупроводников СО РАН, 630090, Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, 13.*

³ *Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН, 119991, Москва, Ленинский проспект, 53.*

⁴ *Университет Регенсбурга, Регенсбург, D-93053, Германия.*

⁵ *Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Ленинские горы, 1, стр.3, Москва, 119991, Россия.*

Транспортные свойства топологических материалов являются объектом повышенного интереса и активно исследуются. Топологически нетривиальная фаза твердого раствора $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x < 0.16$) характеризуется сравнительно низкими концентрациями носителей заряда в объеме, что позволяет исследовать транспортные свойства соединения методами оптоэлектронного зондирования. В этих объектах удалось зарегистрировать положительную терагерцовую фотопроводимость, обладающую рядом характерных особенностей [1]. Красная граница эффекта в терагерцовой области не наблюдалась. В настоящей работе исследована фотопроводимость в структурах на основе топологической фазы $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ при фотовозбуждении в СВЧ диапазоне.

Исследованные гетероструктуры синтезированы методом молекулярно-лучевой эпитаксии на полуизолирующей подложке GaAs [013] с буферными слоями CdTe и ZnTe. Рабочий слой структур представляет из себя твердый раствор $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($0.12 < x < 0.16$) толщиной ~ 4 мкм. Все образцы характеризуются n-типом проводимости. Значения концентрации свободных электронов в объеме составляют $\approx 10^{14}$ см⁻³ при $T = 4.2$ К. Фотопроводимость исследовалась под действием возбуждающего излучения с частотой 50 ГГц в широком температурном диапазоне – от 4.2 К до 300 К.

В структурах на основе топологической фазы $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($x < 0.16$) фотопроводимость в СВЧ диапазоне наиболее выражено проявляется при температурах $T < \sim 7$ К. При этом повышение температуры сопровождается достаточно резким спадом амплитуды эффекта. В основе проявления положительной СВЧ фотопроводимости могут лежать различные механизмы, в том числе болометрический эффект, а также диффузия разогретых носителей заряда из объема активного слоя структуры к границе топологической фазы с последующим увеличением подвижности.

Литература

1. Galeeva A.V., Artamkin A.I., Kazakov A.S. *et al* // Beilstein J. Nanotechnol. – 2018. – № 9. С. – 1035.

СПИН-ПОЛЯРИЗОВАННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ МАГНИТНОГО ТУННЕЛЬНОГО НАНОКОНТАКТА С МУЛЬТИФЕРРОИКОМ BiFeO_3

Усеинов Н. Х.

Институт физики Казанский федеральный университет, Казань, Россия,

E-mail: nuseinov@mail.ru

Использование антиферромагнитного мультиферроидного барьера в качестве функционального материала в магнитном туннельном наноконтакте вызывает значительный интерес из-за новых функциональных возможностей, недоступных в обычных магнитных туннельных контактах. Переключение ферроэлектрической поляризации барьера изменяет спин-поляризованную проводимость, что приводит к эффекту туннельного электросопротивления (ТЭС). В частности, использование антиферромагнитного магнитоэлектрического барьера из BiFeO_3 в магнитном туннельном наноконтакте делает его устройством с низким энергопотреблением [1], где ТЭС сосуществует с туннельным магнитосопротивлением (ТМС) [2].

В настоящее время мы разрабатываем простую модель мультиферроидного (МФ) туннельного наноконтакта (МФТК), который состоит из двух ферромагнитных электродов, разделённых ферроэлектрическим барьерным слоем BiFeO_3 . В приближении почти свободных электронов аналогично [3,4] рассматривается процесс баллистического транспорта электронов в МФТК с неколлинеарной ориентацией намагниченностей в полубесконечных ферромагнитных (ФМ) электродах с тонким (в несколько нанометров) мультиферроидным слоем.

Для расчёта транспортных свойств МФТК необходимо, прежде всего, вычислить коэффициенты прохождения электронов проводимости через потенциальный барьер. Выражение для потенциального барьера записывается с использованием приближения Томаса-Ферми, в котором учитывается эффект спин-зависимого экранирования встроенного в мультиферроик заряда на интерфейсах слоёв [2,3], величины и ориентации намагниченностей слоёв МФТК и приложенного напряжения [4]. Коэффициенты прохождения для туннелирующих электронов находятся путём решения уравнения Шрёдингера с энергетическим потенциалом U_s в пяти областях и использованием метода трансфер-матрицы от волновых функций ψ_s ($s = \uparrow, \downarrow$ – спиновый индекс) для заданной поляризации спина электрона и ориентации намагниченностей в слоях гетероструктуры.

Расчёт компонент спин-поляризованной проводимости (кондактанса) проводится на основе интегрирования квантово-механического выражения для коэффициента прохождения с учётом приложенного напряжения и поворота оси квантования спина электрона проводимости. Интегрирование проводится по углу падения электрона на границу ФМ и барьерного слоя с учётом закона сохранения компонент волновых векторов на уровне Ферми.

Предварительные результаты показывают, что эффект спин-зависимого скрининга может быть существенным и может вносить значительный вклад в спин-поляризованную проводимость, ТЭС и ТМС в МФТК.

Литература

1. Heron J.T., Schlom D.G., Ramesh R. // *Appl. Phys. Rev.* – 2014. – V. 1. – P. 021303.
2. Zhuravlev M.Y., Maekawa S., Tsymbal E.Y. // *Phys. Rev. B.* – 2010. – V. 81. – P.104419.
3. Useinov A., Chshiev M., Manchon A. // *Phys. Rev. B.* – 2015. – V. 91. – P. 064412.
4. Useinov N.Kh., Chuklanov A.P., *et al.* // *Phys. of the Solid State.* – 2020. – V. 62. – P.1706.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АКТИВНЫХ СИСТЕМ СКОЛЬЖЕНИЯ МЕТОДАМИ ДИФРАКЦИИ ОБРАТНО-РАСSEЯННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ И СЕЛЕКТИВНОГО ХИМИЧЕСКОГО ТРАВЛЕНИЯ В ГЦК МАТЕРИАЛАХ

Чуешова А.Г.¹, Пещерова С.М.¹, Хорошева М.А.² Вдовин В.И.³, Федина Л.И.³

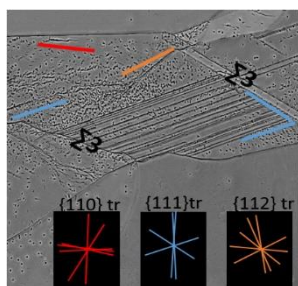
¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геохимии им. А.П. Виноградова Сибирского отделения Российской академии наук, Иркутск, Россия

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики твёрдого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, Черногоровка, Россия

³Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия

Скольжение дислокаций и двойникование являются основными механизмами деформации в материалах с гранцентрированной, объёмно-центрированной кубической и гексагональной плотноупакованной решётками. Для того, чтобы определить какой механизм деформации может преобладать в зёрнах с различными ориентациями необходимо установить критерий выбора комбинаций активных систем скольжения и двойникования (для ГЦК структуры известны 12 мод скольжения дислокаций $\{111\}$ - $\langle 110 \rangle$ и 12 мод двойникования $\{111\}$ - $\langle 112 \rangle$).

Одним из подходов к определению активных систем скольжения дислокаций является сравнение возможных следов скольжения (пересечение плоскости скольжения с поверхностью кристалла), полученных из дифракции обратно-рассеянных электронов, и выявляемых с помощью селективного химического травления [1]. Применение данного подхода для анализа двойников в *mc*-Si показало, что наиболее вероятная система двойникования имеет наименьший угол между возможными и наблюдаемыми линиями скольжения. На рис.1 данный факт отображен синими линиями (угол отклонения от следа плоскости $\{111\}$ составляет $2,75^\circ$). Однако, установление наиболее активной системы скольжения (двойникования) затруднительно при наличии двух и более систем скольжения, имеющих одинаковый угол отклонения, а также при отсутствии совпадений следов плоскостей и наблюдаемых линий скольжения (т.е. когда угол отклонения составляет 10 - 15°). Так, на рис.1 видно, что угол отклонения оранжевой линии от наблюдаемой линии двойникования для следов плоскостей $\{111\}$ - $\langle 112 \rangle$ составляет 10° . В данной работе использовался расширенный подход для идентификации активных систем скольжения и двойникования в *mc*-Si с использованием программного пакета atex (определение следов скольжения дислокаций, вычисление фактора Шмида), собственных расчётов по углам Эйлера (определение систем скольжения, соответствующих максимальному фактору Шмида, определение фактора геометрической совместимости для $\Sigma 3$ границ), а также изображений травлённой поверхности, полученных с помощью оптического и электронного микроскопов. Основная проблема указанного выше



подхода заключается в неоднозначности при определении мод скольжения и двойникования в зёрнах с кристаллографически эквивалентными углами Эйлера ($123,3$ $46,9$ $23,1$ / 338 $46,9$ $63,1$). Для устранения данного противоречия необходимо использовать кристаллографические соотношения эквивалентности углов Эйлера для формулы фактора Шмида.

Рис.1 Изображение травлённой поверхности в СЭМ с нанесёнными следами скольжения

1. Ervik T. et al. High temperature annealing of bent multicrystalline silicon rods //Acta materialia. – 2012. – Т. 60. – №. 19. – С. 6762-6769.

АНГАРМОНИЗМ ФОНОНОВ В НОВЫХ МАГНИТНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРАХ $MnBi_2Te_4$

**Максимов А.А.¹, Тартаковский И.И.¹, Абдуллаев Н.А.^{2,3}, Зверев В.Н.¹,
Алигулиева Х.В.⁴, Бадалова З.И.², Алиев З.С.³, Амирасланов И.Р.^{2,3},
Мамедов Н.Т.^{2,3}, Чулков Е.В.^{5,6}**

¹*Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка, Россия*

²*Институт физики Мин. науки и обр. Азербайджана, Баку, Азербайджан*

³*Бакинский Государственный Университет, Баку, Азербайджан*

⁴*Сумгаитский Государственный Университет, Сумгаит, Азербайджан*

⁵*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия*

⁶*Donostia International Physics Center (DIPC), Donostia-San Sebastian, Spain*

E-mail: abnadir@mail.ru

Соединение $MnBi_2Te_4$ является членом большого семейства новых полупроводниковых магнитных топологических изоляторов $(MnBi_2Te_4)(Bi_2Te_3)_n$ [1]. Электронная структура поверхностных состояний, магнитные и транспортные свойства подробно изложены в [2].

Нами были исследованы спектры комбинационного рассеяния света в монокристаллах $MnBi_2Te_4$ в широком интервале температур 5-300К. Экспериментально впервые обнаружена самая низкая КР-активная мода E_g^1 с частотой 26.6 см^{-1} , впервые теоретически предсказанная в [1]. Одним из признаков ангармонизма является изменение частот фононов с температурой. Исследована температурная зависимость величин КР-активных частот, данные $|\Delta\omega|/\omega$ для $\Delta T=290\text{K}$ приведены в Таблице 1.

Мерой ангармонизма фононов являются параметры Грюнайзена в кристаллах. Величины модовых параметров Грюнайзена γ_j , вычисленных как $\gamma_j=(B/\omega_j) \cdot (d\omega_j/dp)$, представлены в Таблице 1. Здесь B – объёмный модуль упругости и $d\omega_j/dp$ определены из данных работы [3]. Как видно из Таблицы 1, величины γ_j мод E_g^2 и A_{1g}^1 , связанных с межслоевыми смещениями выше.

Таблица 1.

Ангармонические параметры $(d\omega/dp, |\Delta\omega|/\omega, \gamma_j)$ в монокристаллах $MnBi_2Te_4$.

Modes	$\omega, \text{ см}^{-1},$ T=300K	B, [3] GPa	$d\omega/dp, [3]$ $\text{см}^{-1}/\text{GPa}$	γ_j	$10^3 \cdot \Delta\omega /\omega$ $\text{см}^{-1}/\text{K}$
E_g^1	26.6	51	-	-	48
E_g^2	47.2	51	1.2	1.3	32
E_g^3	103.6	51	1.5	0.74	39
A_{1g}^1	66.7	51	3.6	2.75	37
A_{1g}^2	110	51	-	-	-
A_{1g}^3	139.4	51	2	0.73	42

Литература

1. Aliev Z.S., Amiraslanov I.R., Abdullayev N.A., Mamedov N.T., Babanly M.B., Chulkov E.V. et al. // Journal of Alloys and Compounds. – 2019. – V. 789. P. – 443-450.
2. Otrokov M.M., Klimovskikh I.I., Aliev Z.S., Amiraslanov I.R., Mamedov N.T., Abdullayev N.A., Zverev V.N., Chulkov E.V. et al. // Nature. – 2019. – V. 576. P. - 416-422.
3. Pei C., Xia Y., Wu J., Zhao Y., Gao L., Ying T., Gao B., Li N., Yang W., Zhang D., Gou H., Chen Y., Hosono H., Li G., and Qi Y. // Chin. Phys. Lett. - 2020. – V. 37. P.-066401.

ИЗУЧЕНИЕ СТРОЕНИЯ ОБРАЗЦОВ СЛОИСТЫХ КАРБОНОВЫХ КОМПОЗИТОВ С ПОМОЩЬЮ ЛАБОРАТОРНОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ МИКРОТОМОГРАФИИ.

Асадчиков В. Е.¹, Левин В. М.², Кривоносов Ю. С.¹, Бузмаков А. В.¹,
Волков В. В.¹, Артюков И. А.³

¹ ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия, E-mail:
Yuri.S.Krivososov@yandex.ru

² Институт биохимической физики РАН, Москва, Россия, E-mail:
levin1943@gmail.com

³ Физический институт имени П.Н. Лебедева РАН, Москва, Россия, E-mail:
iart@mail.ru

Слоистые композитные материалы в настоящее время широко используются в различных технических применениях. Они представляют собой пластмассы, армированные углеродными волокнами. Их применение определяется набором уникальных свойств, таких как малый вес и высокая механическая прочность с заданными свойствами и анизотропией, обусловленными архитектурой углепластикового материала. Армированные углеродным волокном полимеры состоят из волокон диаметром 4-8 мкм, которые собраны в нити и слои препрега толщиной 70-200 мкм. Регулярное расположение волокон, пропитанных эпоксидной смолой, образует слои, уложенные в композиты из углепластика различных типов, в зависимости от их ориентации – однонаправленной, поперечно-слоистой или квазиизотропной. В углеродных слоях наблюдается высокий уровень эластичности и анизотропии прочности [1].

В настоящей работе микротомографию проводили с помощью «in-line» метода рентгеновского фазового контраста. Для измерений были использованы схемы с разными полихроматическими источниками, а именно со стандартной широкофокусной рентгеновской трубкой [2] и микрофокусным источником. Используемое томографическое оборудование позволило получить трехмерное изображение объектов с разрешением на уровне 10-20 мкм. В результате проведенных томографических измерений удалось визуализировать внутреннюю структуру образцов. А именно, для препрега толщиной 0.2 мм были показаны нити, составляющие слой, также выявлены дефекты его структуры в виде локальных полостей. В четырехслойном образце толщиной 0.8 мм были установлены толщины слоев, а также показана взаимно перпендикулярная ориентация [0/90/90/0] слоев. Следует отметить, что размеры образцов заметно различаются по разным направлениям, что, естественно, приводит к значительным различиям в рентгеновском поглощении при получении томографических проекций. Это затруднило получение реконструкций, но не помешало восстановлению удовлетворительного трехмерного изображения. С помощью метода малоуглового рентгеновского рассеяния показано, что внутренняя структура нитей также ориентирована вдоль волокон. Рассчитанное распределение по размерам неоднородностей в нитях содержит основной пик со средним диаметром (расстоянием упаковки) порядка 7 ангстрем и малоинтенсивные пики на 18 и 32 ангстрем.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН (в части проведения томографических исследований).

Литература

1. Levin V., Petronyuk, Y., Artyukov, I. et al. //Polymers. – 2023. – Т. 15. – №. 2. – С. 276.
2. Ю. С. Кривоносов, А. В. Бузмаков, В. Е. Асадчиков и др. // Кристаллография, 2023, том 68, № 2, с. 189–195.

СЛОИСТО-ВОЛОКНИСТЫЙ Nb–Al–Mo КОМПОЗИТ, АРМИРОВАННЫЙ ВОЛОКНАМИ САПФИРА

Кийко В.М., Коржов В.П., Курлов В.Н.

Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка Московской обл., Россия,

kiiko@issp.ac.ru

Растущие потребности по увеличению потолка рабочих температур конструкционных материалов неизбежно приводят к необходимости включения в их состав традиционно не используемых соединений (оксидов, интерметаллидов) в качестве основных компонентов структуры. Обладая потенциально высокой жесткостью, прочностью и сопротивлением ползучести, эти соединения во многих случаях являются хрупкими. Это ставит задачу разработки нехрупких структур, содержащих хрупкие компоненты [1].

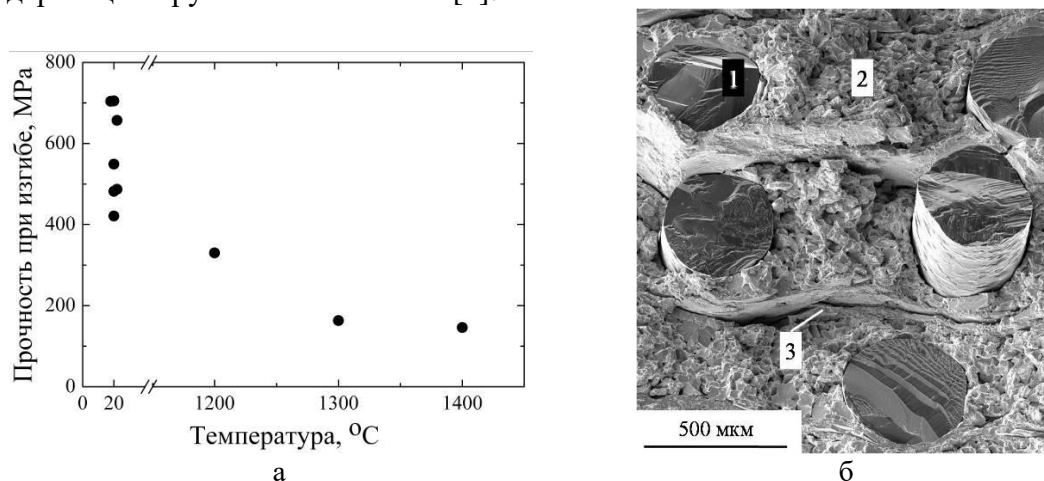


Рис. 1. Зависимость прочности композитных образцов от температуры (а); (б) – участок поверхности разрушения образца, испытанного при 20 °С: 1 – волокно, 2 – слой исходного порошка ниобия, 3 – слой исходных фольг алюминия и молибдена.

Композит изготавливался твердофазным методом горячего прессования слоистой заготовки с поочередным чередованием однонаправленных волокон сапфира, разделенных порошком ниобия, и слоев алюминиевой и молибденовой фольг с образованием в технологическом процессе слоев Nb_2Al , Nb_3Al , Mo_3Al интерметаллидов [2]. Испытания на прочность (рис. 1а) показали, что полученный композит удовлетворяет требованиям к высокотемпературным материалам такого рода [3, 4].

Литература

1. Милейко С.Т. // Наука – производству. – 2007. – № 2. – С. 10–24.
2. Кийко В.М., Коржов В.П., Стрюков Д.О., Шикунов С.Л., Шикунова И. А., Курлов В.Н. / Патент РФ. 07.07.2021. № 2751062.
3. Светлов И.Л. // Материаловедение. – 2010. – № 9. – С. 29–38.
4. Светлов И.Л. // Материаловедение. – 2010. – № 10. – С. 18–27.

МАКРОСКОПИЧЕСКАЯ КВАНТОВАЯ ДИНАМИКА ДВУХ СВЯЗАННЫХ ФЛЮКСОНОВ В ПАРАЛЛЕЛЬНОМ МАССИВЕ ДЖОЗЕФСОНОВСКИХ КОНТАКТОВ

Сеидов С. С.¹, Фистуль М. В.²

¹НИТУ «МИСиС», Москва 119049, Россия

²Theoretische Physik III, Ruhr-Universität Bochum, Bochum 44801, Germany

Магнитные флюксоны это топологические солитоны, возникающие в низкоразмерных сверхпроводящих системах, в частности, в параллельных массивах джозефсоновских контактов. Параллельный массив джозефсоновских контактов образован цепочкой сверхпроводящих ячеек, содержащих джозефсоновские контакты. Тогда магнитный флюксон представляет собой кинк сверхпроводящей фазы джозефсоновских контактов в массиве. На рис. 1 изображён параллельный массив джозефсоновских контактов и распределение фаз, образующих кинк.

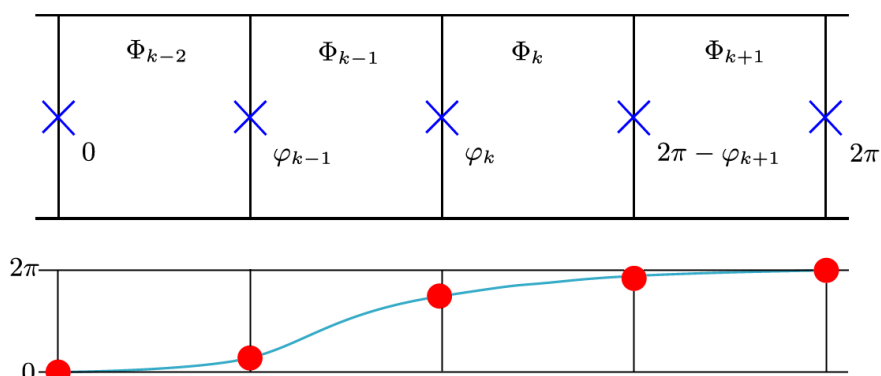


Рис. 1.: Параллельный массив джозефсоновских контактов (сверху), содержащий один магнитный флюксон в k -ой ячейке, и соответствующее распределение фаз φ_i , образующих кинк (снизу). Φ_i — значения потока магнитного поля, пронизывающего каждую ячейку.

В работе исследована макроскопическая квантовая динамика двух магнитных флюксонов, помещённых в параллельный массив джозефсоновских контактов с высокой кинетической индуктивностью. Высокая кинетическая индуктивность достигается за счёт включения в ячейки массива большого числа дополнительных джозефсоновских контактов. Благодаря ей характерный размер магнитного флюксона уменьшается до размера ячейки массива, что позволяет добиться квантовой, а не классической динамики. Динамика двух флюксонов была сведена к задаче о перескоке на двумерной решётке с дефектом. В результате было описано связанное состояние двух флюксонов, возникающее несмотря на существующее между флюксонами отталкивающее взаимодействие. Для него, а также для несвязанного состояния с двумя независимыми флюксонами, были описаны квантовые биения, блоховские осцилляции при приложении к массиву постоянного тока и характерная для них вольт—амперная характеристика в форме «блоховского носа».

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства "Приоритет-2030" (грант НИТУ «МИСиС» № K2-2022-025) и Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Госзадания (проект № 0718-2020-0025).

ПРОПИТКА ГРАФИТА АЛЮМИНИЕМ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Антанович А.А.

ФГБУН институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верецагина Российской Академии наук, Москва, г. Троицк, Россия, antanov@hppi.troitsk.ru

Пропитка под высоким давлением является наиболее эффективным способом получения металлографитовых композитов. Существует несколько способов и видов аппаратуры для создания высокого давления пропитки, каждый из которых имеет свои недостатки. Газостатические аппараты высокого давления дороги в изготовлении и эксплуатации, а также взрывоопасны. Устройства высокого давления, принцип действия которых основан на термическом расширении матричного сплава в замкнутом объеме, требуют неоправданно большого количества матричного металла в десятки раз превышающего требуемые расчетные значения.

В настоящей работе приведены некоторые результаты исследований по пропитке графита марки ГМЗ алюминиевым сплавом Д16. Для этой цели использовали аппарат высокого давления типа «цилиндр-поршень», который был разработан для проведения процессов пропитки и карбонизации под высоким давлением в технологии производства углерод-углеродных композиционных материалов [1]. Диаметр заготовок графита составлял 38 мм, высота 20 мм. Расчетное количество алюминиевого сплава, определенное из условия полного заполнения пор графита, составило 10 г. Для проведения пропитки под давлением применяли аппарат высокого давления с внутренним диаметром 150 мм и высотой 70 мм. Состав и последовательность операций были аналогичны используемым при пропитке графита свинцом [2]. Нагрев при вакуумировании контейнера с образцом и навеской алюминиевого сплава проводили до температуры 750 °С, термобарическую обработку в аппарате высокого давления при температуре 750°С и давлении 100 МПа.

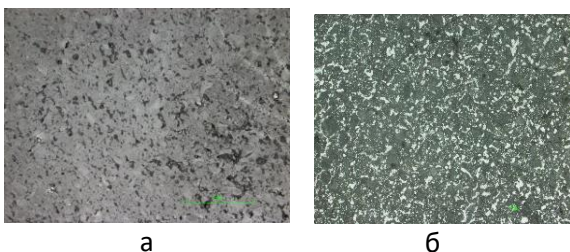


Рис 1. Фотография поверхности а- графита ГМЗ, б – композита

Таблица 1. Свойства материалов

Свойства/Материал	ГМЗ	Ком- позит
Плотность, г/см ³	1.65	2.21
Пористость, %	26	12
Прочность на сжатие	36	118

На Рисунке 1 приведены фотографии торцевых поверхностей цилиндрических образцов графита и композита, полученные с помощью оптического микроскопа Nikon SMZ 1270, после механической обработки материалов, а в Таблице 1 некоторые свойства этих материалов. Впечатляет более, чем трехкратное увеличение прочности на сжатие композита по сравнению с чистым графитом.

1. Антанович А.А. // Материалы. Технологии. Инструменты. 2009. Т. 14. № 4. С. 78-81.
2. Антанович А.А. // Материалы международной научно-практической конференции ICMSSTE 2021. 2021. Ялта. С. 56-63.

ДИОДНЫЙ ЭФФЕКТ В СТРУКТУРАХ $Gd_3Ga_5O_{12}/Y_3Fe_5O_{12}/Nb$

Успенская Л.С., Егоров С.В.

Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна РАН, uspenska@issp.ac.ru

В последние годы большое внимание уделяется развитию сверхпроводящей электроники [1]. В частности, на базе структур сверхпроводник-магнито-мягкий и магнито-жесткий ферромагнетики реализованы спиновые клапаны [2], а на структурах ферромагнетик-сверхпроводник - магниторезистивные переключатели [3], т.е. переключение сопротивления сверхпроводника магнитным полем. В настоящее время интенсивно исследуются возможности бесполевого переключения структур гибридных структур [4,5] Недавно мы показали [6,7], что в структурах $Y_3Fe_5O_{12}/Al$ в области температуры сверхпроводящего перехода возможно переключать сопротивление структур как поворотом магнитного поля, так и инверсией тока. Эффект хорошо описывался влиянием поля Зеемана на сверхпроводящий переход алюминия. В данной работе мы предлагаем использовать магнитострикционный эффект в ИЖГ для создания структур, в которых сопротивление переключается инверсией тока, и экспериментально показываем возможность реализации этой идеи на примере структуры $Gd_3Ga_5O_{12}/Y_3Fe_5O_{12}/Nb$, где магнитная доменная структура гранатовой пленки специфически модифицируется за счет деформации при определенном выборе ориентации полоски ниобия.

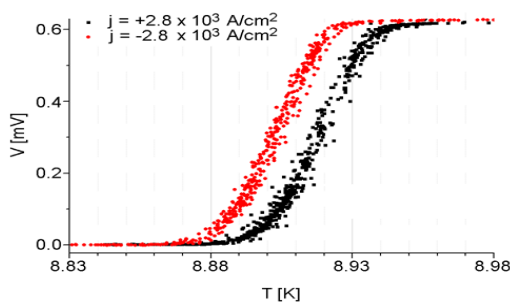


Рисунок 1. Изменение сопротивления структуры $Gd_3Ga_5O_{12}/Y_3Fe_5O_{12}/Nb$ при инверсии тока

Литература

1. Sidorenko A. (Ed.) // Functional Nanostructures and Metamaterials for Superconducting Spintronics. NanoScience and Technology, Springer, Cham. – 2018. https://doi.org/10.1007/978-3-319-90481-8_1.
2. Deminov R.G., Tagirov L.R., Gaifullin R.R., et al. // J. Magn. Magn. Mater. – 2015 – V. 373. – P.16-17.
3. Карелина Л.Н., Больгинов В.В., Эркенов Ш.А., Егоров С.В., Головчанский И.А., Чичков В.И., Хамида Я.Бен, Рязанов В.В. // Письма ЖЭТФ – 2020 – Т. 112. – №11., с. 743 – 748.
4. Santamaria Ja. // Nature Materials – 2022 – V. 21. – p. 993-1002.
5. Уставщиков С. С., Левичев М. Ю., Пашенькин И. Ю., Гусев Н. С., Гусев С. А., Водолазов Д. Ю. // ЖЭТФ – 2022 – Т.162. – № 2(8) – С. 261–266.
6. Tikhomirov O.A., Skryabina O.V., Uspenskaya L.S. // Journ. Magn. Magn. Mat. – 2021 – Т. 535. – P.168071.
7. Скрыбина О.В., Успенская Л.С. // ФТТ– 2022 – Т. 64. – № 10. – С. 1373-1377.

НЕ-ДРУДЕПОДОБНОЕ ПОВЕДЕНИЕ ФОТОИНДУЦИРОВАННОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ GaAs и Si в ГИГАГЕРЦОВОМ ДИАПАЗОНЕ ЧАСТОТ

Бутылкин В.С.¹⁾, Крафтмахер Г.А.²⁾, Фишер П.С.³⁾

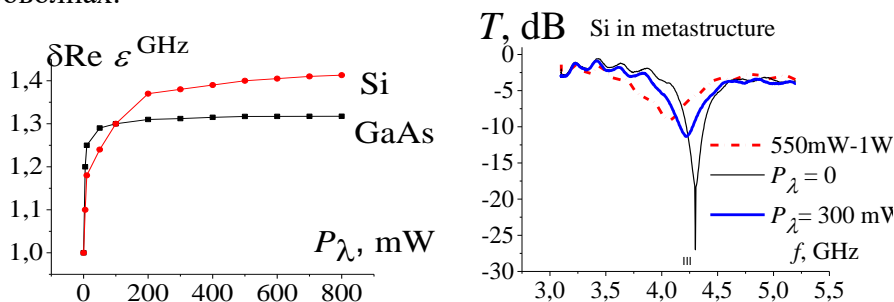
Фрязинский филиал Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН, пл. Введенского, 1, Фрязино Московской обл., 141190 Российская федерация
E-mail: ¹⁾ vasebut@yandex.ru, ²⁾ gaarkr@mail.ru, ³⁾ fisherps@mail.ru

В настоящее время с развитием микроволновой фотоники, связанной с передачей, приемом и преобразованием информации с помощью волн микроволнового диапазона и фотонных систем, востребованы оптически управляемые мета(нано)-структуры и полупроводники как элементы управления в них. В связи с этим актуальны исследования фотоиндуцированной диэлектрической проницаемости ε полупроводников в микроволновом диапазоне, учитывая, к тому же, наблюдаемые существенные различия в ТГц -диапазоне (друдеподобное поведение в рамках механизма свободных носителей заряда, проявляющееся убыванием $\text{Re} \varepsilon_{p_\lambda}^{\text{THz}}$ с ростом мощности облучения P_λ) и в ГГц-диапазоне (не-друдеподобное, обнаруженное экспериментально в CdS, CdSe [1] в виде увеличения $\text{Re} \varepsilon_{p_\lambda}^{\text{GHz}}$ с ростом P_λ).

Модель Друде, разработанная в свое время для металлов, оказалась приемлемой для полупроводников в ТГц-диапазоне. В [2] нами выдвинута гипотеза о связи фотоиндуцированной ε в ГГц- и ТГц-диапазонах с экситонами, изложен теоретический подход, позволивший описать и объяснить поведение ε , охватывая широкий спектральный диапазон.

В данной работе обнаружено не-друдеподобное поведение $\text{Re} \varepsilon_{p_\lambda}^{\text{GHz}}$ экспериментально для GaAs и Si измерениями резонаторным методом величины $\delta \text{Re} \varepsilon^{\text{GHz}} = (\text{Re} \varepsilon_{p_\lambda}^{\text{GHz}} - 1) / (\text{Re} \varepsilon_{p_\lambda=0}^{\text{GHz}} - 1)$, а также измерениями резонансного эффекта метаструктуры по сдвигу резонансной частоты в сторону низких частот с увеличением P_λ , (рис 1 и 2). T – коэффициент прохождения микроволн (частота f) с метаструктурой в волноводе, $\lambda=0.97\text{мкм}$ – длина волны волоконно-лазерного облучения.

Общность результатов измерений, полученных для полупроводников разных типов (прямозонного GaAs и непрямозонного Si) в разных электродинамических системах (волноводы, резонаторы, метаструктуры), свидетельствует о закономерном характере наблюдаемой взаимосвязи между явлениями в фотонике и электродинамике на микроволнах.



1. Крафтмахер Г.А., Бутылкин В.С., Казанцев Ю.Н., Мальцев В.П., Фишер П.С., // Письма в ЖЭТФ. – 2021. – Т. 114. – вып. 9. – С. 586-595.
2. Бутылкин В.С., Фишер П.С., Крафтмахер Г.А., Казанцев Ю.Н., Каленов Д.С., Мальцев В.П., Пархоменко М.П. // РиЭ. – 2022. Т. – 67. – № 12. – С. 1185-1191.

СЛОИСТЫЙ Ti–Al–Nb КОМПОЗИТ: ПОЛУЧЕНИЕ, СТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Кийко В.М., Коржов В.П.

Институт физики твердого тела РАН, г. Черноголовка Московской обл., Россия,
kiiko@issp.ac.ru

Композит изготавливался твердофазным методом диффузионной сварки слоистого пакета, содержащего фольги титана и алюминия, покрытого с одной стороны суспензией порошка ниобия в поливинилбутирале. Изготовление выполнялось в две стадии. Первая стадия имела режим $1400\text{ }^{\circ}\text{C} - 8.2\text{ МПа} - 2\text{ ч}$ (температура – давление – время), которая обеспечила прочность при трехточечном изгибе при комнатной температуре $390 \pm 120\text{ МПа}$ с коэффициентом вариации 32%. С целью увеличения прочности в дополнение к первой была проведена вторая стадия диффузионной сварки в режиме $1500\text{ }^{\circ}\text{C} - 13\text{ МПа} - 2\text{ ч}$, которая привела к увеличению прочности до $660 \pm 8.6\text{ МПа}$ с коэффициентом вариации 1.3%. Пример зависимости прогиба одного из образцов от нагрузки показан на рис. 1а, – вид деформационной кривой свидетельствует о нехрупком характере поведения материала под нагрузкой, структура которого содержит хрупкие интерметаллиды.

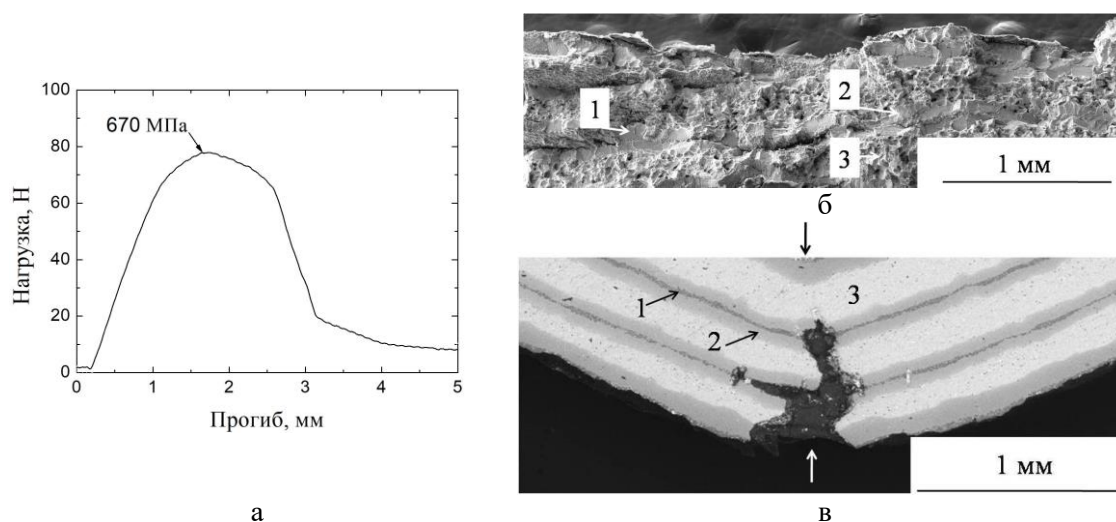


Рис. 1. а – пример зависимости прогиба от нагрузки при испытаниях образца на трехточечный изгиб при комнатной температуре, в поле графика указан предел прочности материала образца; б – участок поверхности разрушенного образца; в – участок продольного сечения образца после испытаний с макротрещиной, черной стрелкой показано направление приложения нагрузки, белой – направление распространения макротрещины. 1 – область, содержащая титан, 2 – область, содержащая титан, алюминий и ниобий, 3 – область, содержащая преимущественно ниобий.

Исследование структуры композита, выполненное на цифровых электронных сканирующих микроскопах Tescan VEGA-II XMU и CamScan MV230 (VEGA TS 5130MM), оснащенных детекторами вторичных и отраженных электронов и энергодисперсионными рентгеновскими микроанализаторами, совместно с диаграммами состояния показало, что она представляет прочную и трещиностойкую слоистую структуру, которая представляет чередование слоев твердых растворов и интерметаллидов систем Ti–Al (Ti_3Al , TiAl и TiAl_3 , Ti_2Al) и Nb–Al (Nb_3Al), см. рис. 1б и рис. 1в.

ДИНАМИЧЕСКИЕ ЗАРЯДОВЫЕ СТРАЙПЫ И ВОЛНЫ ЗАРЯДОВОЙ ПЛОТНОСТИ В АНИЗОТРОПНОМ ДВУХЩЕЛЕВОМ СВЕРХПРОВОДНИКЕ ZrB_{12}

Болотина Н.Б.^{1,2}, Хрыкина О.Н.^{1,2}, Азаревич А.Н.¹, Шицевалова Н.Ю.³,
Филипов В.Б.³, Гаврилкин С.Ю.⁴, Габани С.⁵, Флахбарт К.⁵, Случанко Н.Е.¹

¹Институт общей физики им. Прохорова РАН, Москва, Россия, nes@it.gpi.ru

²Институт кристаллографии им. Шубникова ФИЦ «Кристаллография и
фотоника» РАН, Москва, Россия, nb_bolotina@mail.ru

³Институт проблем материаловедения им. Францевича НАНУ, Киев,
Украина, nshitsevalova@gmail.com

⁴Физический институт им. Лебедева РАН, Москва, Россия, gavrs@lebedev.ru

⁵Институт экспериментальной физики САН, Кошице, Словакия, flachb@saske.sk

Детали кристаллической структуры двухщелевого сверхпроводника ZrB_{12} [1,2] изучены при низких температурах методом прецизионной рентгеновской дифракции. Небольшие статические ян-теллеровские искажения g_{2k} решетки с понижением температуры в диапазоне 30–70 К сопровождаются возникновением двух типов сингулярностей электронной плотности (ЭП), - (i) динамических зарядовых страйпов вдоль выделенных направлений $\langle 110 \rangle$ и $\langle 112 \rangle$ в монокристалле ZrB_{12} (см. рис.1, правая панель) и (ii) треугольной структуры пучностей ЭП, расположенных в междоузлиях решетки бора в плоскостях $\{111\}$, проходящих через атомы бора (рис.1, левая панель). Обнаруженная впервые в ZrB_{12} треугольная решетка ЭП является волной зарядовой плотности (ВЗП), которая возникает и усиливается при охлаждении. В результате измерений низкотемпературной теплоемкости и намагниченности во внешнем магнитном поле, направленном вдоль трех главных осей в кристалле, $H \parallel [100]$, $H \parallel [110]$ и $H \parallel [111]$, установлено, что двухщелевая сверхпроводимость в ZrB_{12} характеризуется значительной анизотропией, которая, по-видимому, связана с особенностями рассеяния носителей на ВЗП и флуктуациях ЭП и взаимодействием вихревой решетки с динамическими страйпами.

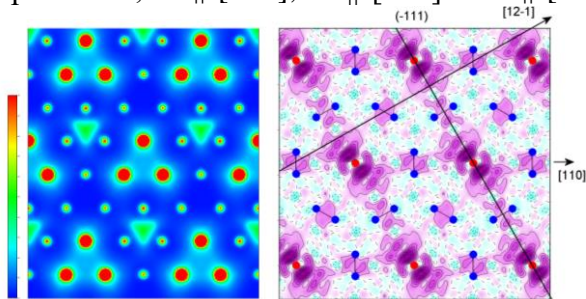


Рис. 1: (Левая панель) Карты распределения полной ЭП в плоскостях (111) ZrB_{12} при $T=97$ К. Распределение получено методом максимальной энтропии. Плоскости проходят через атомы бора в треугольных гранях кубооктаэдров B_{12} . Пики ЭП ограничены на уровне $0,2\% g_{\max}(r)$. (Правая панель) Разностный Фурье-синтез распределения ЭП в плоскости (-111) решетки ZrB_{12} при $T=70$ К. Синтез выполнен по измерениям, усредненным в классе -1. Плоскость проведена через атомы Zr (красные кружки); в каждой паре В-В (синие кружки) один выше, а другой ниже плоскости на $\sim 0,7$ Å. Области положительных и отрицательных значений ЭП выделены синим и розовым цветом. Шаг изолиний $0,1 e \cdot \text{Å}^{-3}$.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФ № 22-22-00243.

Литература

1. Azarevich A., Bogach A., Glushkov V., et al.// Phys. Rev. B -2021.- V.103.- 104515 (1-15).
2. Bolotina N. B., Khrykina O. N., Azarevich A. N., et al.// Phys. Rev. B -2022.- V.105.- 054511 (1-6).

РОЛЬ ИЗГИБНОЙ ДЕФОРМАЦИИ ОТРАЖАЮЩИХ ПЛОСКОСТЕЙ ПРИ АНОМАЛЬНОМ ПРОХОЖДЕНИИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

Суворов Э.В.¹, Смирнова И.А.¹

¹ИФТТ РАН, Черноголовка, Моск. обл. Россия, suvorov@issp.ac.ru

Образование дифракционного изображения дефектов кристаллической решётки в рентгеновской топографии многоступенчатый и сложный процесс. От его расшифровки зависят точность сведений, получаемых экспериментатором о дефектах. С другой стороны, процессы формирования рентгеновского волнового поля при дифракции на локальных искажениях кристаллической решетки представляют самостоятельный чисто научный интерес.

В работах [1, 2] изучалось дифракционное изображение краевой дислокации в монокристалле кремния, расположенной перпендикулярно поверхности толстого (1810 мкм) кристалла кремния (бормановский контраст).

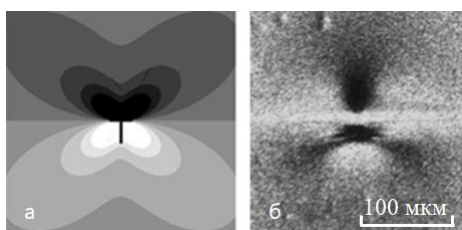


Рис.1. а) - Деформационное поле краевой дислокации; б) - наблюдаемое в эксперименте дифракционное изображение краевой дислокации (Si, отражение (220), излучение $\text{CuK}\alpha$).

Из рис.1а видно, что деформационное поле краевой дислокации *симметрично* относительно вертикальной плоскости, а относительно горизонтальной плоскости имеет цветную симметрию. Именно относительно горизонтальной плоскости регистрируемое дифракционное изображение имеет заметную асимметрию (рис.1б).

Для изучения этого интересного явления методами численного интегрирования уравнений Такаги [3, 4] и методом траекторий [5] исследовано влияние изгибной деформации отражающих плоскостей кристаллической решетки в случае аномального прохождения рентгеновских лучей на формирование дифракционного изображения. На рис. 2 приведена зависимость интенсивности в центре треугольника рассеяния от радиуса изгиба кристалла.

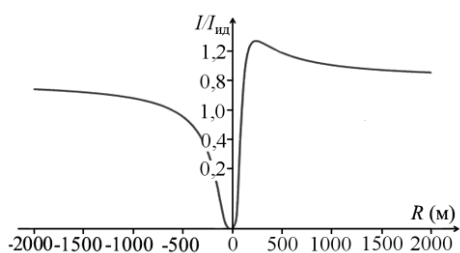


Рис.2 Интенсивность аномального (бормановского) волнового поля в центре треугольника рассеяния в зависимости от радиуса изгиба отражающих плоскостей (нормирована на интенсивность идеального кристалла).

При радиусе изгиба ≈ 200 метров начинается заметное подавление эффекта Бормана. И наконец, наиболее интересное - поведение интенсивности аномального волнового поля в треугольнике рассеяния зависит от знака радиуса изгиба.

Литература

1. Суворов Э.В., Смирнова И.А. // Поверхность. Рентгеновские, Синхротронные и Нейтронные исследования. – 2008. - № 10. - С. 7–12
2. Смирнова И.А., Суворов Э.В., Шулаков Е.В. //ФТТ. - 2007. - Т. 49. - №6. - С.1050-055
3. Takagi S.J. // Phys.Soc.Japan. – 1969. - vol.26. - N5. - P.1239-253
4. Инденбом В.Л., Чуховский Ф.Н. // УФН. - 1972. - Т.107/ - № 2. - С. 229-265.
5. Authier A. // Dynamical Theory of X-ray Diffraction 3rd ed. Oxford University Press. 2005.

О ПРОТИВОРЕЧИИ ТЕОРИИ ПОТОКОВОГО КУБИТА ПРИНЦИПУ РАБОТЫ ЭЛЕКТРОДВИГАТЕЛЯ

Никулов А.В.

*Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов
РАН, 142432 г. Черноголовка, Московская обл., Россия, nikulov@iptm.ru*

Имеется огромное число публикаций посвященных потоковому кубиту (flux qubit) [1], который считается перспективным элементом для создания квантового компьютера. Но авторы этих публикаций игнорируют очевидные противоречия теории потокового кубита, т.е. сверхпроводящего контура с одним или тремя джозефсоновскими переходами и магнитным потоком кратным половине $SB = \Phi = (n + 0.5)\Phi_0$ кванта потока $\Phi_0 = 2\pi\hbar/q$. Теория предполагает суперпозицию двух состояний n и $n + 1$ с равным по величине, но противоположно направленным током $I_p(n) = -I_p(n+1)$. Это предположение с очевидностью противоречит закону сохранения [2], так как моменты импульса сверхпроводящего конденсата в состояниях n и $n + 1$ различаются на макроскопическую величину $\approx 10^5 \hbar$ при типичных значениях тока в кубите $I_p \approx 0.5 \text{ мкА}$ и площади его контура $S \approx 1 \text{ мкм}^2$ [1].

Теория flux qubit основана на уверенности, что энергии двух состояний n и $n + 1$ равны $E_i(n) = E_i(n+1)$, так как в ней рассматривается только кинетическая энергия тока. Обосновывая учет только кинетической энергии, М. Тинкхам писал: «Поскольку энергия из-за полевого члена $\hbar^2/8\pi$ меньше, чем кинетическая энергия тока, на множитель порядка отношения поперечного сечения проводника к λ^2 , то в достаточно тонком сверхпроводнике можно этим членом пренебречь» [3]. Действительно, так как кинетическая индуктивность $L_k = ml/sq^2n_q = (\lambda^2/s)\mu_0l$ сверхпроводящего провода с малым сечением $s \ll \lambda^2$ много больше магнитной индуктивности $L \approx \mu_0l$, то энергии магнитного поля $E_f = L_f I^2/2$ много меньше кинетической энергии $E_k = L_k I^2/2$, создаваемых током I : $E_f/E_k = L_f/L_k \approx s/\lambda^2 \ll 1$. $\lambda \approx 50 \text{ нм}$ - величина называемая лондоновской глубиной проникновения магнитного поля.

Но кроме энергии магнитного поля есть еще энергии $E_M = -M_m B$ магнитного момента $M_m = IS$, создаваемого током I циркулирующем в контуре площадью S . При изменении внешнего магнитного поля электродвижущая сила Фарадея $-d\Phi/dt = -SdB/dt - L_f dI/dt$ индуцирует в сверхпроводящем контуре ток $L_k dI/dt = -d\Phi/dt$, равный $I = -\Phi/L_k \approx -SB/L_k$ когда магнитного поля увеличилось от нуля до B и $L_f/L_k \approx s/\lambda^2 \ll 1$. Энергия магнитного момента $E_M = -M_m B = -I\Phi$ в два раза больше кинетической энергии $E_k = L_k I^2/2 = I\Phi/2$ по абсолютной величине и имеет противоположный знак. В теории flux qubit предполагается, что энергии двух состояний n и $n + 1$ равны, так как равны кинетические энергии этих состояний $E_k = L_k I^2/2 = (n\Phi_0 - \Phi)^2/2L_k$, при $\Phi = (n + 0.5)\Phi_0$. Но при учете энергии магнитного момента полная энергия равна $E_t = E_k + E_M = (n^2\Phi_0^2 - \Phi^2)/2L_k$. Поэтому теория flux qubit имеет смысл, если только $E_M = 0$. Но при отсутствии энергии $E_M = -M_m B$ магнитного момента $M_m = IS$ контура с током электродвигатель не мог бы работать. Таким образом теория flux qubit противоречит принципу работы электродвигателя.

Работа выполнена в рамках государственного задания № 075-01304-23-00.

Литература

1. Chiorescu I., Nakamura Y., Harmans C., Mooij J. E. // Science – 2003 – V. 299 – P. 1869.
2. Nikulov A.V. // Quantum Computers and Computing - 2010 – V. 10 – P. 42.
3. Тинкхам М. Введение в сверхпроводимость. Атомиздат 1980.

СВЕРХПРОВОДЯЩИЙ ПЕРЕХОД НЕ МОЖЕТ БЫТЬ ФАЗОВЫМ ПЕРЕХОДОМ СОГЛАСНО ЗАКОНУ СОХРАНЕНИЯ ЭНЕРГИИ

Никулов А.В.

*Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов
РАН, 142432 г. Черноголовка, Московская обл., Россия, nikulov@iptm.ru*

Теории сверхпроводимости являются одним из самых выдающихся достижений теоретической физики двадцатого века. Но эта теория основана на очевидной ошибке сделанной после открытия эффекта Мейсснера в 1933 году. Физики до 1933 года понимали, что работа по созданию энергии магнитного поля $VBH/2$ в объеме V идеального проводника равна нулю $A_s = VBH/2 = 0$ так как $B = 0$. Поэтому свободная энергия не должна увеличиваться $F_{sH} = F_{s0}$. В нормальном состоянии $F_{nH} = F_{n0} + E_m$, так как энергия магнитного поля $VE_m = V\mu_0 H^2/2$. Физики до 1933 года понимали также, что при переходе сверхпроводника в нормальное состояние источник мощности соленоида совершает работу $A_{sn} = V\mu_0 H^2 = V2E_m$, половина которой создает энергию магнитного поля E_m в нормальное состояние, увеличивая свободную энергию $F_{nH} = F_{sH} + E_m$, а вторая половина индуцирует токи Фуко, которые диссипируют в джоулево тепло [1].

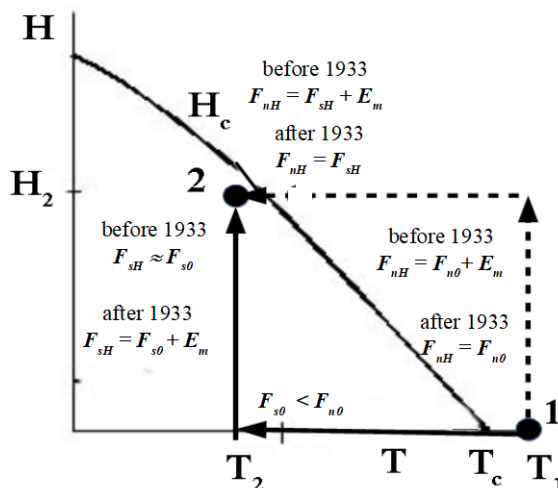


Рис.1. Температурная зависимость критического магнитного поля $H_c(T)$ объемного сверхпроводника. После открытия эффекта Мейсснера в 1933 году изменилось представление о сверхпроводящем переходе и об изменении свободной энергии в магнитном поле.

Но если переход в нормальное состояние это необратимый процесс, при котором происходит генерация джоулево тепла, то эффект Мейсснера опровергает второй закон термодинамики. Из-за веры в этот закон, сверхпроводящий переход в магнитном поля стали считать фазовым переходом, для чего пришлось постулировать равенства $F_{sH} = F_{s0} + E_m$; $F_{nH} = F_{n0}$; $F_{nH} = F_{sH}$, Рис.1, противоречащие закону сохранения энергии. Из этих ложных равенств было выведено выражение для разности свободных энергий $F_{n0} - F_{s0} = \mu_0 H_c^2/2$, объясненное теорией БКШ [2].

Работа выполнена в рамках государственного задания № 075-01304-23-00.

Литература

1. Keesom W.H., Kok, J.A. // Physica. – 1934 – V.1 – P. 595.
2. Bardeen J., Cooper L.N., Schrieffer J. R. // Phys. Rev. - 1957 – V. 106 – P. 162.

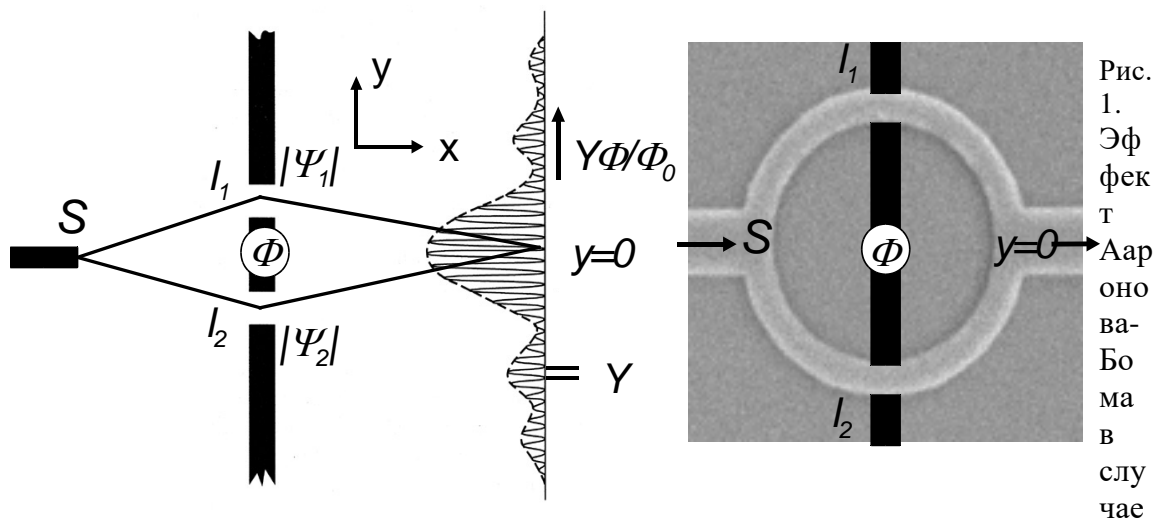
ОБ ЭФФЕКТЕ ААРОНОВА-БОМА В КОЛЬЦАХ

Никулов А.В.

*Институт проблем технологии микроэлектроники и особо чистых материалов
РАН, 142432 г. Черноголовка, Московская обл., Россия, nikulov@iptm.ru*

Эффект Ааронова-Бома является следствием влияния электромагнитного потенциала на фазу волновой функции: так как импульс частицы с массой m и зарядом q равен $p = mv + qA$, то магнитный поток внутри замкнутого контура I может влиять или на градиента фазы, или скорость v частиц, даже если магнитное поле $B = \text{rot } A$ равно нулю в области траектория частиц. A - вектор потенциала. Из требование однозначности волновой функции следует, что набег фазы по замкнутому контуру должен быть кратен 2π . Это требование не выполняется когда для описания эксперимента необходим коллапс волновой функции, как в случае эксперимента по интерференции частиц на двух щелях [1], Рис.1.

Для описания эффекта Ааронова-Бома в кольце коллапс не требуется, так как частица попадает в одну точку $y = 0$, в отличии от интерференции на двух щелях, Рис.1. Поэтому в этом случае набег фазы кратен 2π , и от магнитного потока зависит круговая скорость v электронов или куперовских пар. Авторы [2] не принявшие во внимание этого принципиального различия предсказали, что вероятность прохождения электронов через кольцо зависит от магнитного потока, что противоречит закону сохранения импульса. Это тоже самое как если Ааронов и Бом [1] предсказали зависимость от магнитного потока вероятности прохождения частиц через две щели. Авторы [2] сделали очевидную ошибку так как они буквально следуя работе Ааронова и Бома, не учли, что разные квантовые явления описываются по разному.



интерференции на двух щелях (слева) и в кольце (справа). В обоих случаях есть замкнутый контур образованный двумя путями движения заряженных частиц от начальной точки до конечной точки, внутри которого находится длинный соленоид создающий магнитный поток Φ .

Работа выполнена в рамках государственного задания № 075-01304-23-00.

Литература

1. Aharonov Y., Bohm D. // Phys. Rev. – 1959 – V.119 – P. 485.
2. Dmitriev A.P., Gornyi I.V., Kachorovskii V.Yu., Polyakov D.G., Shmakov P.M. // Письма в ЖЭТФ -2014 – Т. 100 – P. 946.

О ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЕ ЧИСТОГО ТИТАНА ПОСЛЕ БОЛЬШИХ ПЛАСТИЧЕСКИХ ДЕФОРМАЦИЙ

Шурыгина Н. А.^{1,2}, Глезер А. М.¹, Велигжанин А.А.³,
Сундеев Р. В.^{1,2}, Рассадина Т.В.²

¹Федеральное государственное унитарное предприятие “Центральный научно-исследовательский институт черной металлургии имени И.П. Бардина”, Москва, Россия, shnadya@yandex.ru

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “МИРЭА – Российский технологический университет”, Москва, Россия

³Федеральное государственное бюджетное учреждение “Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

Использование технически чистого титана в различных областях техники и медицины предпочтительно из-за высокой его биосовместимости, коррозионной стойкости и отсутствия в нем токсичных элементов. Повышение прочности чистых металлов, в том числе титана, до уровня прочности сильно легированных сплавов возможно путем различных экстремальных воздействий на объемный материал. Большие пластические деформации оказывают существенное влияние на структуру и свойства твердых тел. К наиболее развитым методам экстремальных деформационных воздействий относится деформация кручением под высоким давлением. За последние годы интерес к такому способу воздействия на материалы существенно возрос, поскольку он дает возможность создавать уникальные наноструктурные состояния и тем самым значительно повысить физико-механические свойства металлических материалов. В последнее время всё с большим распространением начинают использоваться новые методы определения локального атомного окружения. К ним, в первую очередь, относится метод EXAFS-спектроскопии (Extended X-Ray Absorption Fine Structure) с синхротронным возбуждением сигнала, который является одной из характеристик объемного состояния вещества.

В качестве материала для исследования был выбран технически чистый титан, в котором на процессы структурообразования при пластической деформации в минимальной степени влияют атомы примесей или избыточные фазы. Образцы в виде пластин были подвергнуты КВД (6 ГПа) в камере Бриджмена при комнатной температуре (293 К) со скоростью вращения подвижного бойка 1 об/мин и при числе полных оборотов подвижной наковальни $N = 1/4; 1/2; 1; 2; 3$ и 4. В результате больших пластических деформаций могут протекать различные фазовые превращения. В технически чистом титане нами было установлено протекание фазового превращения $\alpha \Rightarrow \omega$ мартенситного типа, которое реализуется при критическом значении деформации $N_{cr} = 1/4$ при температуре деформации 293 К. Была показана возможность применять модель «двухфазной смеси», состоящей из рекристаллизованных зерен и деформационных фрагментов, к описанию дефектных структур, формирующихся в процессе кручения под высоким давлением.

Методом EXAFS в синхротронном излучении установлено, что во время кручения под высоким давлением при величине деформации 1 оборот величина расстояния R первой координационной сферы практически коррелирует со значением R для исходного состояния. Однако, во второй координационной сфере наблюдается уменьшение значения R , то есть материал как бы «уплотняется». Дальнейшее увеличение степени деформации до 4 оборотов не оказывает влияния на R для первой и второй координационных сфер, а значение R остается на уровне значения для степени деформации 1 оборот.

О ВОЗМОЖНОСТИ «СУПЕР» ХРАНЕНИЯ ВОДОРОДА В АКТИВИРОВАННЫХ ГРАФИТОВЫХ НАНОВОЛОКНАХ В СВЯЗИ С ПРОБЛЕМАМИ ЧИСТОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

**Нечаев Ю.С.¹, Шурыгина Н.А.¹, Александрова Н.М.¹,
Черетаева А.О.², Денисов Е.А.³**

¹ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», г. Москва, РФ
E-mail: yuri1939@inbox.ru

²Тольяттинский государственный университет, г. Тольятти, РФ

³Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, РФ

На основе использования разработанной эффективной методики и полученных с ее помощью результатов анализа термодесорбционных спектров водорода в углеродных материалах и наноматериалах [1-9] изучены экстраординарные данные [10-12] по «супер» хранению «обратимого» (атомное отношение (H/C) ≤ 4) и «необратимого» ((H/C) ≈ 1) водорода в «ноу-хау» активированных графитовых нановолокнах (ГНВ). Впервые определены характеристики основного десорбционного пика для «необратимого» водорода в ГНВ [11-13]. Показано, что наличие такого пика является характерным признаком (атрибутом) для активированных ГНВ. Рассмотрена физика процессов десорбции «необратимого» и «обратимого» водорода в ГНВ, в т.ч. эффект Курдюмова и спилловер эффект [5].

Список литературы

- [1] Nechaev Yu.S., Alexandrova N.M., Cheretaeva A.O. et al. Studying the thermal desorption of hydrogen in some carbon nanostructures and graphite. // ИЖЕ. 2020. V. 45, P. 25030-25042. [2] Нечаев Ю.С., Александрова Н.М., Шурыгина Н.А. и др. Методология и результаты изучения состояний водорода в графене, графите и сталях. // Изв. РАН, Серия физическая. 2021. Т. 85. С. 918-925. [3] Nechaev Yu.S., Denisov E.A., Cheretaeva A.O. et al. On characteristics and physics of thermal desorption of deuterium from graphite at 700-1000 K. // J. Nucl. Mater. 2020. V. 535. P. 152-162. [4] Нечаев Ю.С., Денисов Е.А., Черетаева А.О. и др. Методика термодесорбционного изучения состояний водорода в углеродных материалах и наноматериалах. // УФН. 2023. [5] Nechaev Yu.S., Alexandrova N.M., Shurygina N.A. et al. On manifestation & physics of the Kurdjumov and spillover effects in carbon nanostructures, under intercalation of hydrogen of high density. // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. 2020. V. 28. P. 233-237. [6] Нечаев Ю.С., Денисов Е.А., Александрова Н.М. и др. О «супер» хранении водорода в ноу-хау активированных графитовых нановолокнах. // Поверхность. 2022. Вып. 2. С. 64-69. [7] Нечаев Ю.С., Денисов Е.А., Шурыгина Н.А. и др. О физике интеркаляции молекулярного водорода в графитовые нановолокна. // Письма в ЖЭТФ. 2021. Т. 114. С. 373-377. [8] Нечаев Ю.С., Денисов Е.А., Черетаева А.О. и др. О фундаментальных аспектах решения проблемы «супер» хранения водорода в каталитически синтезированных графитовых волокнах. // Кинетика и катализ. 2022. Т. 63. № 4. С. 526-539. [9] Nechaev Yu.S., Denisov E.A., Cheretaeva A.O. et al. On the real possibility of “super” hydrogen intercalation into graphite nanofibers. // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. 2022. V. 30. # 1. P. 211-219. [10] Park C, Anderson P.E., Chambers A. et al. Further studies of the interaction of hydrogen with graphite nanofibers. // J. Phys. Chem. B. 1999. V. 103. P. 10572-10581. [11] Baker R.T.K. Encyclopedia of Materials: Science and Technology. Elsevier Ltd., Amsterdam. 2005. P. 932. [12] Gupta B.K., Tiwari R.S., Srivastava O.N. Studies on synthesis and hydrogenation behavior of graphitic nanofibers prepared through palladium catalyst assisted thermal cracking of acetylene. // J. Alloys Comp. 2004. V. 381. P. 301-308.

О ФИЗИКЕ ДЕФОРМАЦИОННОГО СТАРЕНИЯ И СТРЕСС-КОРРОЗИОННОГО РАЗРУШЕНИЯ ТРУБНЫХ СТАЛЕЙ

**Нечаев Ю.С.¹, Шурыгина Н.А.¹, Филиппова В.П.¹, Александрова Н.М.¹,
Морозов Н.С.¹, Черетаева А.О.², Денисов Е.А.³**

¹ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», г. Москва, РФ

E-mail: yuri1939@inbox.ru

²Тольяттинский государственный университет, г. Тольятти, РФ

³Санкт-Петербургский государственный университет, г. Санкт-Петербург, РФ

Работа посвящена изучению, на основе анализа и сопоставления результатов [1-14], характеристик реальных фазоподобных «атмосфер» Коттрелла в ряде металлических материалов, в т.ч. карбидоподобных и карбогидридоподобных наносегрегаций на дислокациях и границах зерен в трубных и других сталях в связи с проблемами старения, водородного охрупчивания и деградации материала при эксплуатации. Особое внимание уделено раскрытию роли и атомных механизмов влияния реальных Коттрелловских наносегрегаций на технологический ресурс материала.

Список литературы

- [1] *Wilde J., Cerezo A., Smith G.D.W.* Three-dimensional atomic-scale mapping of a Cottrell atmosphere around a dislocation in iron. // *Scripta Materialia*. 2000. V. 43 (1). P. 39-48.
- [2] *Нечаев Ю. С.* Физические комплексные проблемы старения, охрупчивания и разрушения металлических материалов водородной энергетики и магистральных трубопроводов. // *УФН*. 2008. Т. 178. №7. С. 709–725.
- [3] *Нечаев Ю.С.* Новые подходы, результаты и методы для решения актуальных проблем старения, водородного охрупчивания и стресс-коррозионного поражения сталей (аналитический обзор). // *Материаловедение*. 2009. №3. С. 50-63.
- [4] Комментарии В.Н. Чувильдеева к статье Ю.С. Нечаева. // *Материаловедение*. 2009. №4. С. 60-61.
- [5] Ответ автора на "Комментарии В.Н. Чувильдеева к статье Ю.С. Нечаева". // *Материаловедение*. 2009. №6. С. 55-60.
- [6] *Нечаев Ю.С.* Распределение углерода в сталях. // *УФН*. 2011. Т. 181. №5. С. 483–490.
- [7] *Нечаев Ю.С., Шурыгина Н.А., Черетаева А.О., Морозов Н.С., Филиппова В.П., Александрова Н.М.* О характеристиках и роли Коттрелловских косегрегаций углерода и водорода в деформационном старении и охрупчивании ряда сталей. // *Поверхность*. 2023.
- [8] *Nechaev Yu.S., Burzhanov A.A., Filippov G.A.* On revealing micromechanisms of the hydrogen plastification and embrittlement of metallic materials // *Advances in Materials Science*. 2007. V. 7, # 1 (11). P. 166-175.
- [9] *Нечаев Ю.С., Родионова И.Г., Удод К.А., Немтинов А.А. и Митрофанов А.В.* Некоторые термодинамические и методические аспекты термодесорбционной спектроскопии водорода в сталях // *ПЧММ*. 2013. № 4. С.5-14.
- [10] *Nechaev Yu.S., Iourtchenko D.V., Hirschberg J.G., Veziroglu T.N.* On the physics of hydrogen plastification and superplasticity of metallic materials and compounds. // *Int. J. Hydrogen Energy*. 2004. V. 29, # 13, P. 1421-1423.
- [11] *Нечаев Ю.С.* Характеристики гидридоподобных сегрегаций водорода на дислокациях в палладии. // *УФН*. 2001. Т. 171. №11. С. 1251–1261.
- [12] *Nechaev Yu.S., Filippov G.A.* Hydride-like segregation at dislocations in α -Fe and steels. // *Defect and Diffusion Forum (DDF)*. 2001. V. 194-199. P. 1099-1104.
- [13] *Nechaev Yu.S.* On Specific Phase Transitions to the Compound-Like Impurity Nanosegregation Structures at Dislocations and Grain Boundaries in Metals and their Influence on Diffusion-Assisted Processes. // *Solid State Phenomena*. 2008. V. 138. P. 91-118.
- [14] *Nechaev Yu.S., Öchsner A.* On the physics of anomalies of boron nanosegregation at dislocations in FeAl. // *Defect and Diffusion Forum (DDF)*. 2019. V. 391. P. 246-250.

ФАЗОВЫЙ СОСТАВ КАРБИДОВ В СПЛАВЕ МОЛИБДЕНА ЛМ2

Гнесин Б.А., Карпов М.И., Аристова И.М., Гнесин И.Б.
ИФТТ РАН, г. Черногловка, Россия, gnesin@issp.ac.ru

Малолегированный сплав молибдена ЛМ2 был получен многократной электроннолучевой плавкой молибдена с добавками (мас.%): 0,02 углерода, 0,20 Ti, 0,15 Zr, 0,30 Hf и 0,40 Ta. После выплавки и последовательно примененной горячей и холодной прокатки в ленту толщиной 0,17 мм с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) были исследованы структура и фазовый состав сплава. Метод микродифракции электронов оказался эффективнее для определения фазового состава, чем рентгеновская дифракция от поверхности листов 0,17 мм. Поскольку объемная доля карбидных фаз составляла не более 1 об.%, это естественно.

В тонких фольгах после холодной прокатки ЛМ2 до 0,17 мм были обнаружены сосуществующие карбиды состава Mo_2C , как орторомбическая, так и гексагональная фазы. Причем часть этих карбидов имела относительно большие размеры - более 1 мкм. Именно строчки из таких карбидов служили местами образования трещин расслоения как на поверхности, так и в объеме листов из сплава ЛМ2. Оказалось, что введение промежуточного отжига выше температуры рекристаллизации, это около 1550 °С, на толщине листов 2,8 мм приводит к растворению крупных карбидов. В отожженном и затем холоднокатаном листе существенно изменяется распределение карбидов по размерам. Исчезают карбиды крупнее 0,3 мкм, и микродифракция выявляет кубические карбиды, изоморфные HfC .

При упоминании диаграммы состояния Mo-C чаще всего ссылаются на работы [1] и [2]. В области малых концентраций углерода между ними имеются заметные отличия. На приводимой в [2] версии диаграммы Mo-C полностью отсутствует линия сольвус со стороны молибдена, при температуре 2200 °С предел растворимости углерода в твердом растворе на основе Mo указан как 0,11 ат%. На диаграмме из работы [1] тот же самый предел растворимости оценен как 1,1 ат., то есть для него в [1] указана концентрация углерода в 10 раз более высокая, чем в [2].

Экспериментально установленный нами факт изменения распределения карбидов по размерам явно свидетельствует в пользу достоверности диаграммы из работы [1].

Обозначения фаз карбида Mo_2C , расположение на диаграммах состояния Mo-C весьма разнообразны в работах, посвященных карбидам Mo_2C .

В картотеке ICDD имеется несколько карточек для карбидов молибдена со стехиометрией, близкой к Mo_2C . При этом различия в положении пиков рентгеновской дифракции для орторомбической (31-0871) и гексагональной (35-787) фаз Mo_2C в области дифракционного спектра, где интенсивность линий дифракции еще заметна, малы. Линии гексагональной фазы при переходе к менее симметричной орторомбической лишь слабо расщепляются и сдвигаются. Для съемки в излучении MoK_α это всего лишь 0,01-0,05°. Ситуация аналогична ГПУ дефектам упаковки в ГЦК металлах. По этой причине во многих случаях вопрос о принадлежности экспериментально изучаемой фазы Mo_2C к той или иной сингонии трудно разрешить с помощью рентгеновской дифракции. В нашем случае микродифракция электронов оказалась более надежной для фазового анализа. Оказалось, что гексагональная и орторомбическая фазы могут сосуществовать. Мы предполагаем, что причиной для этого служит метастабильность обеих фаз в образцах, полученных после кристаллизации и охлаждения до комнатной температуры.

1. Massalski T.V. et al., Binary alloy phase diagrams-Second Edition, Materials Park, 1990.
2. Predel B., C-Mo (Carbon-Molybdenum).https://doi.org/10.1007/10040476_643.

Авторы благодарны ИФТТ РАН за возможность проведения данного исследования.

EVOLUTION OF STRUCTURE OF CoCrFeNiCu HIGH-ENTROPY ALLOY DURING PROLONG ANNEALING

M.V. Poliakov^{1,2,*}, I.A. Mikhaylov¹, T.S. Grishin¹, L.S Volkova¹, A.S Rogachev²

¹*Institute of Nanotechnology of Microelectronics of the Russian Academy of Sciences, 119991 Moscow, Russian Federation ,*

²*Merzhanov Institute of Structural Macrokinetics and Materials Science Russian Academy of Sciences (ISMAN), Chernogolovka, Moscow 142432, Russian Federation*

**email: maxsimpolykovv@gmail.com*

High-entropy alloys (HEA) are metal alloys containing 5 or more elements taken in equal or close mole fractions and forming, as a rule, single-phase disordered substitutional solid solutions with a structure based on the densest BCC or FCC. An important condition for the potential application of HEAs is their thermal stability. It has been established that the change in the phase composition of HEA during heating depends on the composition of the alloy and the method of synthesis. A promising way to obtain HEA is mechanical alloying (MA).

The thermal stability of a high-entropy CoCrFeNiCu alloy was studied during long-term annealing for 204 days in the temperature range 873-1273K. The alloy was obtained by mechanochemical alloying of metal powders in a planetary mill for 120 min in an Ar medium. As a result of MA, a two-phase HEA is formed based on a five-component FCC substitutional solid solution. HEA contains a secondary phase ~ 8.6 wt. % Cr and is characterized by a defective crystal structure formed during deformation processing. Based on the results of X-ray phase and microstructural analyzes by SEM and TEM, it was found that during isothermal annealing at a residual pressure of 1.3 Pa, the phase composition and structure of HEAs change. Long-term annealing over the entire temperature range under study leads to the decomposition of the FCC solid solution with the formation of two FCC solid solutions differing in Cu content. It has been established that the decomposition of the initial FCC phase of HEA occurs within 1–3 days and its completeness increases with an increase in the annealing temperature. After annealing for 204 days at 1073K and 1273K, the content of the Cu-enriched FCC phase decreases to 16–17 wt %., which indicates the evaporation of Cu from the HEA CoCrFeNiCu.

[1] Cantor B. Multicomponent high-entropy Cantor alloys // Progress in Materials Science. 2021. Vol. 120.

[2] Otto F. et al. Decomposition of the single-phase high-entropy alloy CrMnFeCoNi after prolonged anneals at intermediate temperatures // Acta Mater. 2016. Vol. 112. P. 40–52.

ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ, ВЫЗВАННЫЕ КРУЧЕНИЕМ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ, В ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ ТИТАНОВЫХ СПЛАВАХ

Горнакова А.С.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна Российской академии наук,
г. Черноголовка, Россия
alenahas@issp.ac.ru

Обработка двухкомпонентных титановых сплавов с помощью кручения под высоким давлением (КВД) в сочетании с предварительной термообработкой, и различной долей второй компоненты влияет на их фазовый состав, морфологию микроструктуры и позволяет получать широкий спектр механических свойств. В работе было рассмотрено влияние термообработки, КВД и доли легирующего компонента на фазовые превращения в сплавах титан-железо и титан-молибден.

Доля легирующего элемента в исходном сплаве дает нам различный фазовый состав после термообработки. Поэтому у нас были сплавы со 100% α фазой, со 100% β фазой, с различным соотношением ($\alpha+\beta$) фаз, а так же α -интерметаллид.

Из всего разнообразия полученных образцов хотелось бы остановиться на общих закономерностях и отличиях в поведении сплавов:

1. После КВД (нагрузка 7 ГПа, 5 оборотов, 1 оборот в минуту) во всех предварительно отожженных образцах образовалась омега фаза.

2. В сплавах титан-железо прослеживается тенденция, чем больше легирующий компонент, тем выше доля образовавшейся омега фазы, а вот в сплавах титан-молибден ситуация противоположная. Остается открытым вопрос: с чем это может быть связано? С размером атомных радиусов молибдена и железа, температурой плавления этих элементов или с тем, что молибден образует непрерывный твердый раствор с β Ti, а железо ограниченный твердый раствор?

3. На всех образцах было проведено наноиндентирование при комнатной температуре на приборе TI-950 Triboindenter при нагрузке 10 mN с использованием индентора Берковича. Были рассчитаны величины твердости (H) и модуля Юнга (E). Значения H и E для сплавов после КВД увеличиваются. Для сплавов титан-железа H и E растут с долей второй компоненты. В сплавах титан-молибден более твердым является сплав с меньшей долей молибдена, в то время как более низкое значение E в сплаве с большей долей молибдена.

По результатам исследований была опубликована статья по системе титан-молибден [1] и готовится к публикации статья по сплавам титан-железо.

[1] Alena S. Gornakova, Anna Korneva, Alexander I. Tyurin, Natalia S. Afonikova, Askar R. Kilmametov and Boris B. Straumal. Omega Phase Formation and Mechanical Properties of Ti–1.5 wt.% Mo and Ti–15 wt.% Mo Alloys after High-Pressure Torsion. Processes 2023, 11, 221. <https://doi.org/10.3390/pr11010221>

Выражаю глубокую благодарность своим соавторам:

профессору Страумалу Б.Б. (ИФТТ Черноголовка), Тюрину А.И. (ТГУ им. Г.Р. Державина Тамбов), Афониковой Н.С. (ИФТТ Черноголовка), Килмаматову А.Р. (ИФТТ Черноголовка), Корневой А. (Институт металлургии и материаловедения Польской академии наук Краков)

Работа выполнена в рамках госзадания ИФТТ РАН

МИКРОСТРУКТУРА И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ СПЛАВА TiZrHfMoCr ПОСЛЕ ТЕРМООБРАБОТКИ

Горнакова А.С., Страумал Б.Б., Афоникова Н.С., Давдян Г.С.,
Дружинин А.В.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук,
г. Черноголовка, Россия
alenahas@issp.ac.ru

Первые высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) представляли собой набор из пяти или более компонентов в эквипроцентных пропорциях. Для исследователей стало неожиданностью, что такие сплавы могут образовывать однородный неупорядоченный твердый раствор. Оказалось, что это связано с тем, что их уникальная комбинация атомов с разными атомными радиусами может сильно препятствовать зарождению вторых фаз и их последующему росту. Т.к. комбинация химических элементов в ВЭС имеет большое разнообразие, то и перспективные области применения данных сплавов широки.

В работе было исследовано влияние термообработки на микроструктуру и фазовый состав ВЭС TiZrHfMoCr (Ti_{21.99}Zr_{22.49}Hf_{20.35}Mo_{17.45}Cr_{17.73}, ат.%), выплавленного в виде цилиндрического слитка диаметром 10 мм, в индукционной печи в атмосфере чистого аргона. Исходный слиток содержал три фазы: кубическую фазу (Hf)_{sub} (A2) (светло-серая) – 35%, и две фазы Лавеса: (Mo,Cr)₂Zr (C15) – 45% (темно-серая) и Cr₂Zr (C14) – 20%. В отожженных образцах фаза (C14) больше не была обнаружена. На Рисунке 1 представлены РЭМ-изображения отожженных образцов сплава и описано, как меняется доля основных фаз (C15) и (A2).

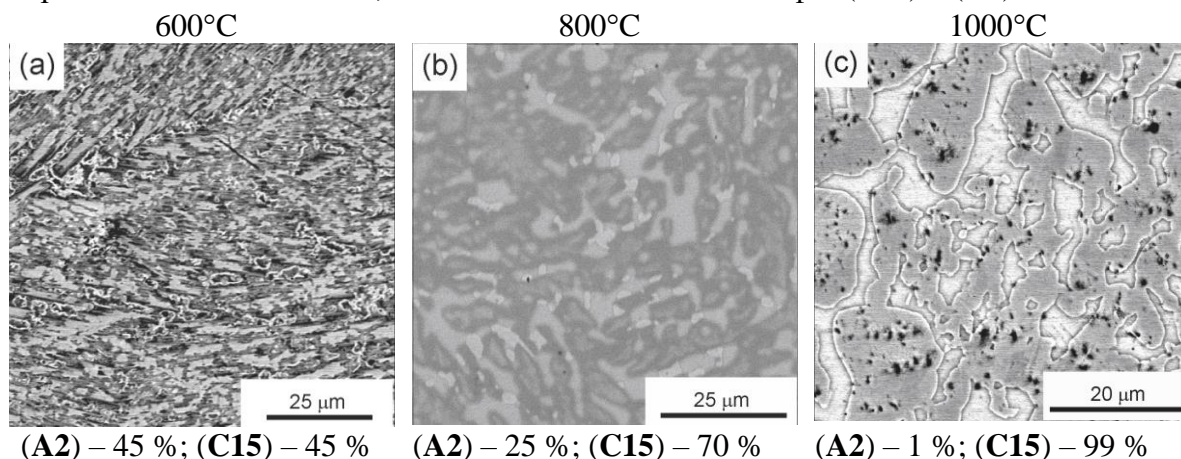


Рисунок 1. РЭМ-изображения микроструктуры сплава TiZrHfMoCr после отжига при различных температурах и фазовый состав, соответствующих образцов.

В ходе работы мы столкнулись с расхождением данных рентгеноструктурного анализа (все данные в работе по фазовому анализу) и с визуальным определением фаз по РЭМ микрофотографиям. Визуально отношение фаз (A2)/(C15) соотносится как ~70/30, в то время как при 1000°C отношение 1/99. Мы предполагаем, что это связано с сильной текстурой кубической фазы (A2).

Авторы благодарят за финансовую поддержку Министерство науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2021-945, номер проекта в ЭБ 13.2251.21.0013).

X-RAY PHASE ANALYSIS AND STRUCTURAL TRANSITIONS IN Cu₂NiSe₂ POLYCRYSTALS

Agamirzoyeva G.M.

*Institute of Physics of the Ministry of Science and Education of the
Republic of Azerbaijan, Baku, Azerbaijan, e-mail: gulabasta@inbox.ru*

Thermomagnetic and thermoelectric materials with low lattice thermal conductivity and high mobility of charge carriers have a wide area of applications as thermoelectric converters [1-3]. Among them are so-called superionic chalcogenides Ag, Cu and various solid solutions based on them. The present work studies synthesis, X-ray phase analysis, and investigation of structural phase transformations in polycrystals of composition CuNiSe₂.

It should be noted that all experimental studies to determine the parameters of the crystal lattice and structural phase transformations in Cu₂NiSe₂ compound are performed on D8 ADVANCE powder diffractometer in 40 kV, 40 mA mode, CuK α radiation, $\lambda=1.5406$, $10^{\circ}\leq 2\theta\leq 80^{\circ}$ in vacuum and Differential Scanning Calorimeter in argon atmosphere within T 20⁰-600⁰C (Bruker, Germany). To achieve this goal, it is first necessary to obtain Cu₂NiSe₂ diffraction pattern at room temperature to determine the lattice parameters of the initial low-temperature phase. The identification of the obtained X-ray diffraction data of the low-temperature phase using the auto-indexing program "TOPAS" shows that the substance under the investigation crystallizes in rhombohedral structure at room temperature and represents the three-packet polytype phase based on β -Cu₂Te [4]. Refined by EVA program the hexagonal lattice parameters at T=315K are as follows: $a_h=4.0500$ Å, $c_h=20.4411$ Å, $V=290.5561$ Å³, $\rho=6.9383$ g/cm³ sp. gr. R-3m, Z=6.

The process of determining Cu₂NiSe₂ phase transformations is made on DSK calorimeter. To do this, the spectrum is obtained from the sample powder within T 20-600⁰C. The heating rate is 3⁰C per minute. As can be clearly seen from the experiment, the formation of two endothermic peaks are found at T 131.6⁰C and 348.8⁰C, respectively. We can conclude that the endothermic peak at T=131.6⁰C corresponds to β -Cu₂Te-type hexagonal phase, whereas the endothermic effect is in agreement with the cubic phase and has Cu₃SeTe-typed structure [5].

Reference:

1. Балапанов М.Х., Якшибаев Р.А., Мухамедьянов У.Х. Явления ионного переноса в твердых растворах суперионных проводниках Cu₂Se, Ag₂Se // ФТТ. 2003. Т. 45. № 4. С. 604–608.
2. Алиев С.А., Алиев Ф.Ф. Влияния флуктуаций на электронные и фононные процессы и термодинамические параметры Ag₂Te и Ag₂Se в области фазового перехода // ФТП. 2003. Т. 42. № 4. С. 404–408.
3. Aliyev Y.I., Asadov Y.G., Ilyasli T.M., Jabarov S.H. et all, Structural aspects of thermal properties of AgCuS compound // Modern Physics Letters B. 2020. V.34. №5. p.2050066.
4. Nowotny H. Die kristallstruktur von Cu₂Te Z.Met allkunde. 1946. V. 37. P. 40–42.
5. Aliyeva, N.A. Acquisition and investigation structure –phase transformation of Cu₃SeTe compounds / N.A. Aliyeva, G.F.Ganizadeh, G.G.Guseyinov [et al.] // AJP Physics, -2017. Vol. XXIII, №3, - p. 24-27.

AV INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГИИ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ α -Fe/Fe₃C

Верховых А. В.¹, Мирзоев А.А.¹, Окишев К.Ю.*²

¹ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», Челябинск, Россия, avverkhovykh@susu.ru

²ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Екатеринбург, Россия

Как известно, в перлите (эвтектоиде сплавов метастабильной системы Fe – Fe₃C — углеродистых сталей) между ферритной ОЦК и орторомбической цементитной Fe₃C фазами могут наблюдаться ориентационные соотношения (ОС) Багарицкого ОС_Б, Исайчева ОС_И и Петча-Питча ОС_П. В низкотемпературном перлите, образующемся при 550–450 °С и обладающем наибольшей прочностью, преобладают ОС_Б и ОС_И [1]. Они отличаются друг от друга разворотом всего на 4°, но габитусной плоскостью пластин в случае ОС_Б является (001)_Ц || {112}_Ф, а в случае ОС_И (101)_Ц || {112}_Ф.

В данном исследовании было проведено моделирование «из первых принципов» структуры и энергии когерентных межфазных границ α -Fe/Fe₃C с этими двумя типами ориентационных соотношений и габитусных плоскостей. Все расчёты были выполнены с помощью теории функционала плотности с использованием обобщённого градиентного приближения (GGA'96) в программном пакете WIEN2k.

Границу с ОС_Б возможно описать с помощью орторомбической ячейки, содержащей 24 атома Fe и 4 атома С. Для описания границы с ОС_И, где габитус не параллелен граням орторомбической элементарной ячейки Fe₃C, использовалась моноклинная (93,9°) суперячейка из 56 атомов Fe и 8 атомов С. Обе суперячейки были оптимизированы по параметрам решётки и положениям атомов.

Результаты расчёта поверхностной энергии межфазных границ составили 0,383 Дж/м² для ОС_Б и 0,594 Дж/м² для ОС_И, что хорошо согласуется с экспериментальными данными (0,700 ± 0,300 Дж/м² [2], 0,690 Дж/м² [3]) и теоретическими значениями для ОС_Б (0,450 Дж/м² [4], 0,615 Дж/м² [5]). Как видим, образование границы с ОС_Б энергетически более выгодно. Различие на 0,211 Дж/м² может играть существенную роль для низкотемпературного перлита с его малой толщиной пластин феррита и цементита и большой площадью межфазных границ в единице объёма.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (государственное задание на выполнение фундаментальных научных исследований №FENU-2023-0011 (2023011ГЗ)).

Литература

1. Счастливец В.М., Мирзаев Д.А., Яковлева И.Л. Структура термически обработанной стали. — М.: Металлургия, 1994. — 288 с.
2. Kramer J.J., Pound G.M., Mehl R.F. // Acta Metallurgica. – 1958. – V. 6 - № 12. – P. 763–771.
3. Li C.-Y., Blakely J.M., Feingold A.H. // Acta Metallurgica. – 1966. – V. 14 - № 11. – P. 1397–1402.
4. Zhang X., Hickel T., Rogal J. et al. // Acta Materialia. – 2015. – V. 99. – P. 281–289.
5. Ruda M., Farkas D., Garcia G. // Computational Materials Science. – 2009. – V. 45. - № 2. – P. 550–560.

ДОМЕННАЯ СТРУКТУРА ТОНКИХ ПЛЁНОК α -Ga₂O₃, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ХЛОРИДНОЙ ЭПИТАКСИИ, ПО ДАННЫМ ПЭМ

Мясоедов А. В.¹, Павлов И. С.², Печников А. И.^{1,3}, Николаев В. И.^{1,3}

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе, г. С-Петербург, Россия, amyasoedov88@gmail.com

²ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, г. Москва, Россия

³ООО «Совершенные кристаллы», г. С-Петербург, Россия

Оксид галлия является ультра широкозонным полупроводниковым материалом перспективным для применения в силовой электронике. Наряду со стабильной β -модификацией, метастабильные фазы оксида галлия вызывают широкий интерес благодаря ряду преимуществ. В частности, α -Ga₂O₃ имеет наибольшую ширину запрещённой зоны ($E_g = 5.3$ eV). Политип имеет кристаллическую структуру корунда и описывается пространственной группой симметрии $R\bar{3}c$. Эпитаксиальные плёнки этого политипа выращивают методом газофазной эпитаксии на сапфировых подложках.

На сегодняшний день дефектная структура этих плёнок изучена далеко недостаточно и остаётся предметом структурных исследований. Известно, что помимо высокой плотности проникающих дислокаций для плёнок характерно возникновение планарных дефектов [1], наблюдаемых в поперечном сечении. Необходимо накопление экспериментальных результатов для определения природы этих дефектов.

В настоящей работе с помощью просвечивающей электронной микроскопии исследована доменная структура, формирующаяся в тонких плёнках оксида галлия α -модификации. Плёнки толщиной 0.8-1.3 мкм были получены на сапфировых подложках базисной ориентации методом хлоридной газофазной эпитаксии.

Для исследования были приготовлены поперечные и планарные сечения плёнок. Именно такое всестороннее рассмотрение позволило подтвердить наличие протяжённых планарных дефектов в плёнках и описать их структуру. Установлено, что стенки располагаются в призматических плоскостях, имеют сложную форму, могут быть замкнутыми, либо заканчиваться на дислокациях. Построение контуров Бюргера вокруг ядер дислокаций позволило установить ненулевую компоненту $\mathbf{b} = a_0/3 \langle 1\bar{1}00 \rangle$, для векторов Бюргера проникающих дислокаций, где a_0 – параметр элементарной ячейки. При этом стенки не наблюдаются на высокоразрешающих изображениях при ориентации электронного пучка вдоль оси зоны [0001]. Из этого можно сделать вывод, что доменные стенки также характеризуются векторами смещения с ненулевой $\mathbf{R} = a_0/3 \langle 1\bar{1}00 \rangle$ компонентой,

В результате работы получены новые данные и развиты представления о доменной структуре и доменных стенках в тонких плёнках α -Ga₂O₃ на сапфировых подложках.

Литература

1. Xu Y., Park J.H., Yao Z., Wolverson C., Razeghi M., Wu J., Dravid V.P. // ACS Appl. Mater. Interfaces. – 2019. – Vol. 11. – no. 5. – pp. 5536-5543.

РОСТОВЫЕ ДИСЛОКАЦИИ В МОНОКРИСТАЛЛАХ СИНТЕТИЧЕСКОГО АЛМАЗА, ИССЛЕДОВАННЫЕ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОПОТОМОГРАФИИ

Анисимов Н. П.^{1,2}, Золотов Д. А.², Бузмаков А. В.², Дьячкова И. Г.²,
Асадчиков В. Е.²

¹МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия, anisimov.np17@physics.msu.ru

²ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

В данной работе приведены результаты исследования ростовых дефектов в монокристаллах синтетического алмаза, выращенных методом НРНТ при предельно низких значениях температуры и давления ($\sim 1250^\circ\text{C}$, ~ 6 ГПа), вблизи линии равновесия алмаз-графит. Данные образцы характеризуются кубооктаэдрическим габитусом с сильно развитыми кубическими гранями $\{100\}$. На сегодняшний день монокристаллы алмаза такого типа остаются относительно мало исследованы. Вместе с тем они представляют особенный интерес для промышленности, поскольку могут быть использованы для изготовления полупроводниковых элементов на алмазных подложках [1].

Использование метода рентгеновской топо-томографии позволило восстановить трехмерную структуру образцов по наборам рентгеновских топограмм, полученных в геометрии Лауэ на лабораторном источнике рентгеновского излучения [2]. Объемная реконструкция для одного из образцов показана на рис. 1а. Наличие трехмерной реконструкции позволило более подробно исследовать распределение ростовых дефектов в изучаемых образцах. Так, удалось выявить два пучка ростовых дислокаций, сформировавшихся в области затравки. Было установлено, что первый из них принадлежит пирамиде роста $\{100\}$ (рис. 1б, пучок 1), второй – пирамиде роста $\{111\}$ (рис. 1б, пучок 2).

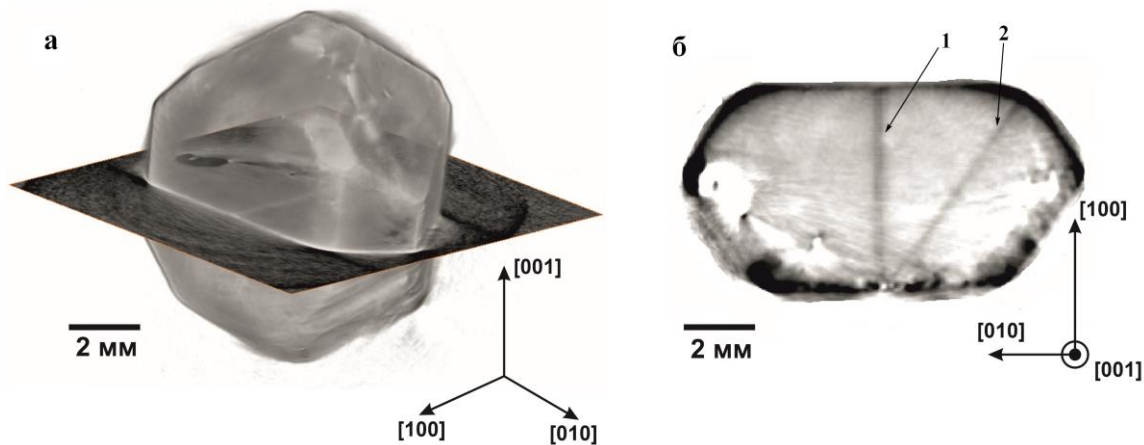


Рис. 1. а – объемная реконструкция монокристалла синтетического алмаза. Показано расположение в объеме слоя, параллельного плоскости кристалла $\{001\}$. б – выделенный слой.

Литература

1. Kasu Makoto // Prog. Cryst. Growth Charact. Mater. – 2016. – Т. 62. – С. 317.
2. Золотов Д. А., Асадчиков В. Е., Бузмаков А. В. и др. // Письма в ЖЭТФ. – 2021. – Т. 113. – № 3. – С. 161-167.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КИСЛОРОДА В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, ПОСЛЕ ХРАНЕНИЯ В ВАКУУМЕ.

А.И. Ильин^{1*}, А.А. Иванов², В.К. Егоров¹

¹ ИИТМ РАН, Россия, 142432, г. Черноголовка, Московская обл., ул. Академика Осипьяна, 6

² НИЯУ «МИФИ» Россия, 115409, Москва, Каширское шоссе, д. 31

*E-mail: alivil2017@yandex.ru

Установлено содержание кислорода по C -параметру решетки как до, так и после выдержки в вакууме 24 часа при 300К в структуре тонких пленок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ толщиной 150–200 нм. Распределение кислорода в пленках зависело от условий скоростной фильтрации частиц эрозионного факела от мишени после импульсов эксимерного лазера, времени осаждения, размера частиц, прошедших через фильтр на подложку $\text{SrTiO}_3(100)$. О наличии в пленках областей с разным содержанием кислорода свидетельствовали дополнительные максимумы на дифракционных пиках (005) пленок с разными $T(R=0)$ до и после выдержки в вакууме, а изменение формы и углового положения пиков кривых качания – об ориентации монокристаллических блоков. Наиболее значимое увеличение δ после выдержки в вакууме происходило в пленках, со-

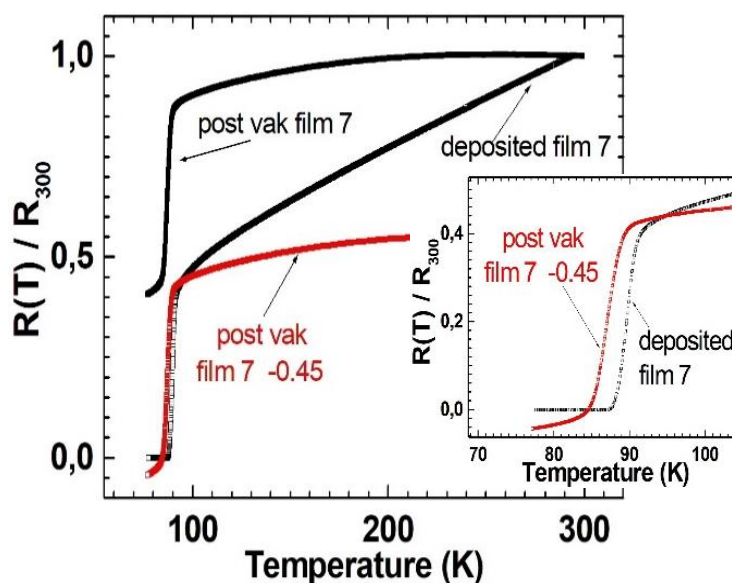


Рис. 1. Зависимости $R(T)/R_{300}$, пленки 7 с $T(R=0) = 87\text{K}$ до и после хранения в вакууме (для сравнения СП- переходов график $R(T)/R_{300}$, после хранения в вакууме сдвинут на 0.45 вниз и выделен цветом). На вставке крупным планом показана область СП-перехода.

стоящих из кристаллов размером 3–10 нм. Данные рентгеноструктурного анализа, СЭМ, а также резистивных измерений, показали сохранение СП-перехода при остаточном сопротивлении на кривых $R(T)$ после выдержки в вакууме (рис.1) и доказывают потери кислорода преимущественно по границам зерен и дефектам структуры, которые в результате диэлектризуются. На основании экспериментальных результатов температуру начала диффузии кислорода в пленках $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ толщиной $\sim 100 - 230$ нм в вакууме уменьшили с известных $\sim 180 - 240^\circ\text{C}$ до 300К.

Литература

1. А.И. Ильин, А.А. Иванов. В.К. Егоров, ФТТ, 64, 9, 1221 (2022)
2. А.И. Ильин, А.А. Иванов. В.К. Егоров, ФТТ, 63, 9, 1209 (2021)
3. A.I. Il'in, A.A. Ivanov, O.V. Trofimov, A.A. Firsov, A.V. Nikulov, A.V. Zotov. Russ. Microelectron. 48, 2, 119

THE EFFECT OF THE SURFACE PATTERNING BY ION BEAM IRRADIATION ON THE Ag DIRECTIONAL OUTFLOW IN Ag/AlN NANO-MULTILAYERS

A.V. Druzhinin¹, C. Cancellieri², N.N. Khrapova¹, B.B. Straumal¹, A.A. Mazilkin¹, J. Janczak-Rusch²

¹*Osipyan Institute of Solid State Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Russian Federation, druzhinin@issp.ac.ru*

²*Empa, Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology, Dübendorf, Switzerland*

Nano-multilayers (NMLs) are functional nano-architectures, which physical properties can be tailored by smart microstructural and interfacial design. Upon thermal treatment, the layered structure of NMLs of immiscible metals degrades, resulting in surface metal filler outflow. The local driving force of the outflow can be modified by external NML surface modification.

In the present work, the effect of surface patterning by focused ion beam in the intensity of Ag surface outflow was investigated in Ag/AlN NMLs. Ag/AlN NMLs were prepared by magnetron sputtering. Afterwards, five narrow lines were sputtered by He-ion focused ion beam (FIB) Zeiss Orion Plus machine. Analysis of the outflow phenomenon was conducted by *in situ* imaging of NMLs heated up in the vacuum chamber of Auger electron spectroscopy instrument. Investigation showed that the amount of Ag crystals formed in the region patterned by ion beam is larger rather in the intact area. It is proposed that FIB patterning can be potentially used as a novel technique for the controlled surface outflow in Ag/AlN NMLs. For more details, see: Druzhinin, A. V. et al. The effect of the surface patterning by ion beam irradiation on the Ag directional outflow in Ag/AlN nano-multilayers. *Vacuum* 210, 111850 (2023).

This work was funded by Russian Science Foundation (RSF) under project № 22-72-00006 (<https://rscf.ru/en/project/22-72-00006/>).

THE ROLE OF ANNEALING ATMOSPHERE ON THE Ag OUTFLOW DRIVING FORCE UPON HEAT TREATMENT OF Ag/AlN NANO-MULTILAYERS

A.V. Druzhinin¹, C. Cancellieri², J. Janczak-Rusch²

¹*Osipyan Institute of Solid State Physics, Russian Academy of Sciences, Chernogolovka, Russian Federation, druzhinin@issp.ac.ru*

²*Empa, Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology, Dübendorf, Switzerland*

Thermally-induced microstructure and property alteration of nano-multilayer (NML) coatings are of principal importance for industrial application. The phenomenon of surface outflow of confined metal is highly promising for the development of NML-based brazing fillers for joining technology. Annealing conditions, such as temperature and atmosphere, are the principal factors defining the outflow characteristics besides the NML design.

The present study addresses the microstructure evolution of Ag/AlN NMLs during thermal treatment in various atmospheres (Ar, air, vacuum). Channels in the NML volume are formed at each annealing atmosphere by grain boundary grooving, which act as pathways for Ag atoms transport to the NML surface. Based on grooving angles, the Ag(111)/AlN(0001) interface energy estimate of 0.54 J/m² at 420°C was derived. Annealing in an inert atmosphere and in vacuum result in a moderate surface outflow of Ag atoms. On the contrary, heat treatment in air results in a chemical interaction of nanolayers with oxygen, substantially intensifying the outflow. This interaction is rationalized by considering the surface energies of Ag/AlN and Ag/Al₂O₃ interfaces, where the latter are formed upon annealing. Besides, the annealing atmosphere has an impact on the shape (elongated whiskers, bulk faceted crystals) of Ag particles formed on the NML surface by modifying silver surface energies.

This work was funded by Russian Science Foundation (RSF) under project № 22-72-00006 (<https://rscf.ru/en/project/22-72-00006/>).

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ВРАЩЕНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЁТОК ВБЛИЗИ ГРАНИЦ ЗЁРЕН

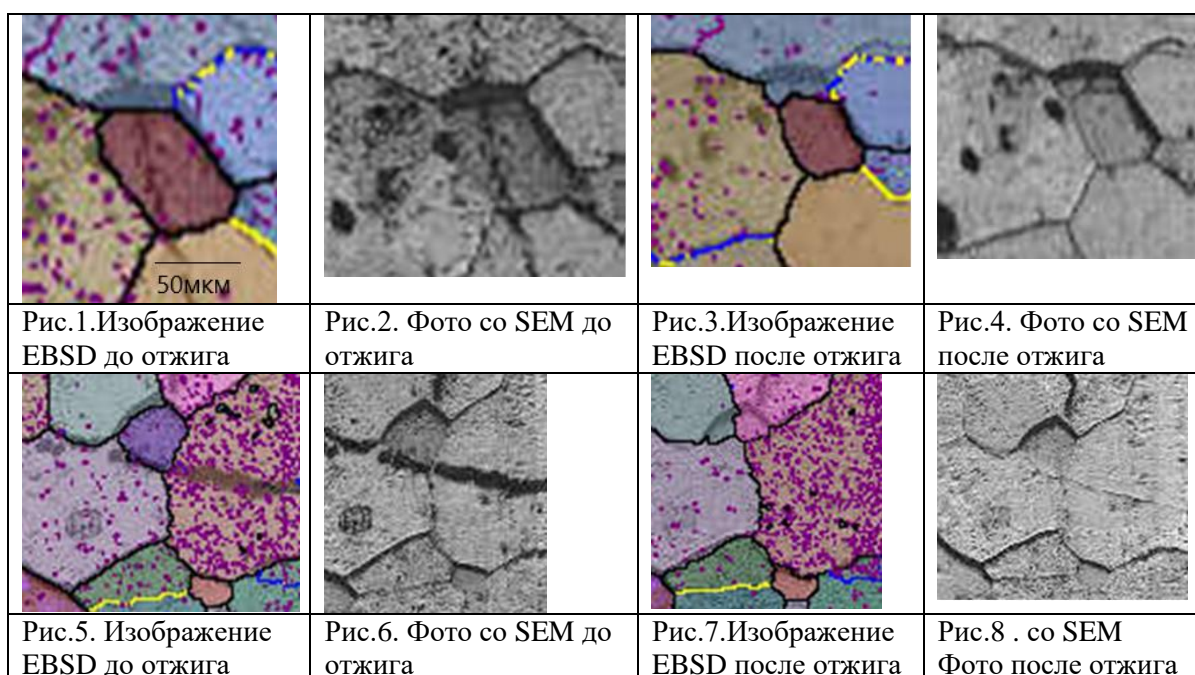
В.Г. Сурсаева

*Институт физики твёрдого тела, РАН, Черноголовка, Московская область, 142432,
Россия*

E-mail: sursaeva@issp.ac.ru

Снижение энергии зернограничной системы может быть обусловлено либо уменьшением площади границ зёрен, либо уменьшением зернограничной энергии как за счёт снижения количества границ с большой энергией, либо за счёт снижения энергии самих границ из-за вращения решёток вблизи границ зёрен. В работе мы приводим доказательство такого вращения. Чтобы реализовалось экспериментально такое вращение мы использовали паркетную структуру в алюминиевых фольгах, в которой движущая сила снижения площади границ и уменьшения границ с большой энергией невелика. Замедление таких процессов способствует образованию канавок термического травления и реализации механизма снижения энергии системы за счёт вращения решёток вблизи границы.

Изучались канавки термического травления EBSD методом. В ходе отжига при отрыве границы от канавки термического травления остаётся область вблизи первоначального положения границы зёрен, которая на EBSD картине выглядит как область отличающейся от окраски соседних зёрен. Это означает, что ориентации кристаллической решетки в этой области отличается от ориентации кристаллической решетки соседних с ней областей. Ширина её порядка 20 мкм. Рис.1-2 зерно до отжига. На Рис. 3-4 тоже зерно после отжига уменьшилось в размере, оставив позади старую канавку и образуя новую. На Рис.5 - 6 исчезающее зерно до отжига. На Рис. 7- 8 тоже самое место, но зерно исчезло полностью, оставив две канавки шириной 10 мкм от большеугловых границ и едва заметные канаки от малоугловых границ. Приводится модель, объясняющая такое явление.



Работа выполнена в рамках госзаказа ИФТТ РАН.

ОСОБЫЕ ГРАНИЦЫ В ПАРКЕТНОЙ И БАМБУКОВОЙ СТРУКТУРЕ АЛЮМИНИЯ

В.Г. Сурсаева

Институт физики твёрдого тела, РАН, Черноголовка, Московская область, 142432, Россия

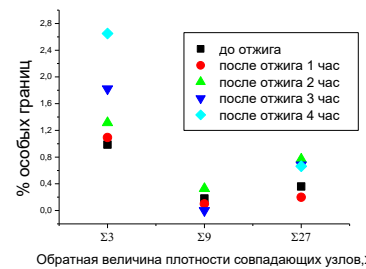
E-mail: sursaeva@issp.ac.ru

Большинство технически важных материалов используются в поликристаллическом состоянии, и их эксплуатация зависит от микроструктуры. Структура границ зёрен, отвечают за такие явления как охрупчивание, коррозия, сегрегация примесей. Например, случайные границы являются слабыми звеньями, для межзёренной коррозии. Определённый тип границ, именуемый как «особый», отмечен как проявляющий наименьшую склонность к таким вредным процессам. Поэтому, чем выше доля таких границ, тем соответственно лучше будут многие свойства. Наиболее распространённая теория структуры границ зёрен – геометрическая модель мест совпадения. Согласно ей есть углы разворота зёрен, при которых положение некоторых атомов в границе отвечает позиции атомов в решётках как одного, так и другого зерна. Такие границы называются «особыми», а степень их совершенства характеризуется величиной Σ – обратной плотностью доли совпадающих атомов двух разделённых границей решёток при мысленном проникновении одной из них в другую. В соответствии с этой моделью должны существовать особые границы в спектре границ наклона $\langle 111 \rangle$ - 60° ($\Sigma=3$), 36.2° ($\Sigma=7$), 27.8° ($\Sigma=13$), 46.8° ($\Sigma=19$); в спектре границ наклона $\langle 110 \rangle$ - 31.59° ($\Sigma=27$), 38.94° ($\Sigma=9$), 50.48° ($\Sigma=11$); в спектре границ наклона $\langle 100 \rangle$ - 23° ($\Sigma=13$), 28° ($\Sigma=17$), 36.8° ($\Sigma=5$).

Работа выполнена на двумерных фольгах с паркетной структурой и проволоках с бамбуковой (одномерной) структурой алюминия. Как показал эксперимент (Таблица 1) количество «особых» и малоугловых границ зависит от вида микроструктуры и способа её получения.

Таблица 1. Доля различных границ в паркетной и бамбуковой структуре.

	Доля границ, %		
	Малоугловые границы	Особые границы $3 < \Sigma < 65$	Особые границы $\Sigma \geq 3^n$
Параметры термообработки	Бамбуковая структура		
T=550 C, $\varepsilon=40-45\%$	11.9	15.7	3.7
T=550 C, $\varepsilon=70-75\%$	23.6	10.4	3.8
T=630 C, $\varepsilon=70-75\%$		16.2	8.1
	Паркетная структура		
T=630 C, $\varepsilon=95\%$	36.0	14.0	5.1



Доля «особых» границ $\Sigma 3^n$ в зависимости от времени отжига в паркетной структуре представляет собой кривую с минимумом при $\Sigma=9$. Значение доли изменяется в три раза с ростом времени отжига.

Работа выполнена в рамках гос заказа ИФТТ РАН.

ЕДИНАЯ ПРИРОДА ДВУХ СПЕКТРОВ МАГНИТОПЛАСТИЧНОСТИ В СВЕРХНИЗКИХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Альшиц В.И., Колдаева М.В., Петржик Е.А., Даринская Е.В.

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия

E-mail: mkoldaeva@crys.ras.ru

В кристаллах NaCl при помещении их в сверхнизкие скрещенные магнитные поля, поле Земли $B_{\text{Earth}} \sim 50$ мкТл и поле переменного тока наблюдаются резонансные пики дислокационных пробегов, а также микротвердости в широком диапазоне частот $\nu \sim 10^4\text{--}10^6$ Гц переменного поля. Измерялись пробеги введенных до эксперимента краевых дислокаций. Начальное и конечное положения дислокаций фиксировались избирательным травлением. Измерение микротвердости проводилось методом Виккерса до и после магнитной экспозиции. Максимальное изменение происходит не сразу, а через 2 – 3 часа, после чего наблюдается постепенная релаксация до исходного значения.

Частотные спектры дислокационной подвижности и максимальных изменений микротвердости, состоящие из отдельных резонансных пиков, разделяются на серии групп по девять пиков в каждой. Этот набор ассоциируется с девятью g -факторами от разных комбинаций атомов лигандов хлора, окружающих примесный катион. Положения всех измеренных резонансных частот хорошо описываются в рамках теории сверхтонких магнитных взаимодействий в парамагнитных центрах при внешнем поле B_{Earth} на несколько порядков ниже локальных полей B_{loc} от лигандов. При максимальных спинах ядра Cl ($I = 3/2$) и радикальной пары электронов на центре ($J = 1$) при каждом значении g -фактора в группе теория предсказывает семь разрешенных низкочастотных переходов ($\sim B$), изменяющих спиновое состояние радикальной пары. Число линий в спектре кратно увеличивается из-за анизотропии сверхтонкого взаимодействия, которая приводит к тому, что резонансные частоты оказываются пропорциональными скалярному произведению $\mathbf{B}_{\text{Earth}} \cdot \mathbf{B}_{\text{loc}}$, т.е. фактору $\cos\angle(\mathbf{B}_{\text{Earth}}, \mathbf{B}_{\text{loc}})$. В спектре для микротвердости экспериментально выявляются три значения косинуса: 1, $1/\sqrt{2}$ и $1/\sqrt{3}$, которые при известном направлении $\mathbf{B}_{\text{Earth}} \parallel [100]$ соответствуют реализациям ориентации поля \mathbf{B}_{loc} вдоль осей симметрии 4, 2 и 3, т.е. $\mathbf{B}_{\text{loc}} \parallel [100]$, $[110]$ или $[111]$. В случае спектра дислокационных пробегов последний вариант не реализуется, что объясняется тем, что дислокации не реагируют на компоненты магнитного поля параллельные их направлениям. Мы имели дело с краевыми дислокациями параллельными $[001]$, так что ориентация поля $\mathbf{B}_{\text{loc}} \parallel [111]$ отличается от $[110]$ как раз компонентой $[001]$ параллельной нашим дислокациям. Поэтому ориентации поля вдоль осей 3 и 2 должны давать в резонансную частоту одинаковый фактор $1/\sqrt{2}$.

PULSED Mg DEPOSITION ON Si FOR GROWTH OF PERFECT Mg₂Si FILMS: PHOTODETECTION AND THERMOELECTRIC PROPERTIES

Chernev I. M.¹, Subbotin E. Yu.¹, Kozlov A. G.², Gerasimenko A. V.³,
Ustinov A. Yu.³, Galkin N.G.¹, Poliakov M. V.^{4,5}, Volkova L. S.⁴, Dudin A. A.⁴,
Gouralnik A. S.¹

¹*Institute of Automation and Control Processes FEB RAS, Vladivostok, Russia,*

*igor_chernev7@mail.ru, jons712@mail.ru, ngalk@dvo.ru, fun_era@mail.ru

²*Far Eastern Federal University, Vladivostok, Russia, kozlov.ag@dvfu.ru*

³*Institute of Chemistry FEB RAS, Vladivostok, Russia, gerasimenko@ich.dvo.ru,*
all_vl@mail.ru

⁴*Institute of Nanotechnology of Microelectronics of the RAS, Moscow, Russia, maxsim-*
polykovv@mail.ru, lidiya.volkova.96@mail.ru, dudin.a@inme-ras.ru

⁵*Merzhanov Institute of Structural Macrokinecs and Materials Science, RAS (ISMAN),*
Chernogolovka, Moscow Region, Russia, maxsim-polykovv@mail.ru

Mg₂Si is narrow band gap n-type semiconductor ($E_g \sim 0.6-0.8$ eV). It is perspective for applications in shortwave infra-red photodetectors, solar cells and thermoelectric elements, consists of abundant, cheap and ecologic components. [1,2]. The special interest is formation of Mg₂Si films on silicon substrate for photo- and thermoelectric conversion applications. But most of the Mg₂Si films grown by different methods has rather poor crystal quality which is one of the reasons of their modest transport properties. Basing on the physical insight into the deposition kinetics and intermixing processes, we explain how and why Mg₂Si can be grown on Si at high temperatures [3]. The films grown by ultra-fast deposition method at $T \approx 380-480$ °C have the best quality to date [4]. In the present work, the deposition rate was $\sim 10^4-10^5$ nm/sec nm/s, the pulse duration was ~ 0.4 s and the substrate temperature was 340-345°C. This process of film growth is similar to Self-Propagating High Temperature Synthesis. This technique made it possible to obtain a Mg₂Si film with the thickness of ~ 1 μ m and almost 100% texture. The grown Mg₂Si film shows the spectral photoresponse extending up to 1400 nm at room temperature and the power factor of $0.6 \mu\text{W/m}\times\text{K}^2$ and $26.5 \mu\text{W/m}\times\text{K}^2$ at room temperature and 410 K, respectively.

An interesting feature of this film is the p-type conductivity which is demonstrated by the thermopower measurements. Tentatively, it can be explained by unintentional doping during the growth procedure. We suggest that p-type of majority carriers could be associated with Mg vacancy and tri-vacancy (V_{Mg} , $V_{\text{Mg}_2\text{Si}}$) and/or interstitial oxygen atoms [5]. These defects could occur in the extremely short and nonequilibrium synthesis process. The p- type conductivity is observed in the temperature range of 180-290 K; at higher temperatures it changes to the negative.

References

1. Zaitsev V. K., Fedorov M. I., Gurieva E. A., Eremin I. S., Konstantinov P. P., Samunin A. Yu., Vedernikov M. V. // Phys. Rev. B. – 2006. – V. 74. P. – 74045207.
2. El-Amir A.A.M., Ohsawa T., Nabatame T., Ohi A., Wada Y., Nakamura M., Fu X., Shimamura K., Ohashi N. // Mater. Sci. Semicond. Process. – 2019. – V. 91. – P. 222-229.
3. Gouralnik A. S., Luniakov Yu. V. // Vacuum – 2022. – V. 196. – P. 110798.
4. Gouralnik A.S., Shevlyagin A.V., Chernev I.M., Ustinov A.Yu., Gerasimenko A.V., Gutakovskii A.K. // Mater. Chem. Phys. – 2021. – V. 258. – P. 123903-123910.
5. Kurokawa M., Shimizu T., Uehara M., Katagiri A., Akiyama K., Matsushima M., Uchida H., Kimura Y., Funakubo H. // MRS Advances. – 2018. – V. 3. – P. 1355-1359.

TRANSPORT AND MAGNETOTRANSPORT PROPERTIES OF ULTRATHIN FeSi FILMS ON Si(111)

**Chernev I.M.¹, Subbotin E.Yu.¹, Maslov A.M.¹, Galkin K.N.¹, Kropachev O.V.¹,
Goroshko D.L.¹, Galkin N.G.¹, Samardak A.Yu.²**

¹ Institute of Automation and Control Processes FEB RAS, Vladivostok, Russia,
igor_chernev7@mail.ru

² Far Eastern Federal University, Vladivostok, Russia

Experimental studies of iron monosilide (FeSi) with a B20-type cubic lattice with space group P213, often called ϵ -FeSi, have been carried out for several decades in the form of single crystals and bulk polycrystals, which is associated with the unusual nature of its electrical [1-3], magnetic [1] and other properties, and manifested itself in the opening of an indirect band gap at temperatures below 100 K [3] and the properties of a bad-metal at high temperatures. However, the structure and properties of epitaxial ultrathin FeSi films on silicon have not been studied.

In this work, epitaxial iron monosilicide films 3–30 nm thick on a Si(111) substrate are grown by SPE and MBE at $T=350^\circ\text{C}$ in ultrahigh vacuum (10^{-9} Torr). Morphology studies have shown that the films are continuous and smooth with an RMS roughness of 0.4 to 1.1 nm. The FeSi structure was confirmed by X-ray diffraction data for all grown films, and the FeSi(111)||Si(111) epitaxial ratios for MBE-grown films were determined. The transport properties of ultrathin FeSi films on a Si(111) substrate are studied by temperature Hall and magnetoelectric measurements in the temperature range of 2–300 K. The observed maximum of the dependence ($\rho(T)$ at 250 K is explained by the formation of a charge density wave in the FeSi film, which was not previously observed for FeSi. The increase in ρ with decreasing temperature from 120 K to 50 K is due to the metal–insulator transition. A slight increase in ρ at $T<50$ K is associated with the effect of weak localization. It has been established that at $T=2$ -300 K and magnetic fields (MF) 0.25 – 8.0 T the Hall coefficient remains positive and corresponds to holes as the main carriers. Magnetoresistance measurements on FeSi films in an MF up to ± 8 T showed that at $T = 60$ –300 K, a parabolic dependence of the MR effect without saturation is observed, with a change from 1% to 20% at an MF of ± 8 T. At temperatures from 50 K to 2 K, positive and negative values of the MR effect are observed up to fractions of a percent, which can be explained by the effect of weak localization, which manifested itself in the dependence ($\rho(T)$). It has been found at 300 K that FeSi films with thicknesses of 3.0–10.0 nm in a magnetic field of ± 2 T have a saturation magnetic moment of 2–5 μmu in the direction perpendicular to the film plane and a coercive force of 1–10 Oe, which characterizes them as a supersoft ferromagnet with perpendicular anisotropy. The studies carried out made it possible to discuss the differences in the transport and magnetic properties of ultrathin films and single crystals (bulk polycrystals) of FeSi.

The study of FeSi films was supported by the Russian Science Foundation grant No. 22-12-00036.

References

- [1] Jaccarino V., Wertheim G. K., Wernick J. H., Walker L. R., Aaraj S. // Phys. Rev. – 1967. – V. 160. – P. 476-482.
- [2] Aeppli G., Fisk Z. // Comments Condens. Matter Phys. – 1992. – V. 16. – P. 155.
- [3] Cloc Ch., Arushanov E., Wendl M., Hohl H., Malang U., Bucher E. // J. All. & Comp. – 1995. – V. 219. – P. 93-96.

ВОЗМОЖНЫЕ ВАРИАНТЫ ПОВЕДЕНИЯ СДВИГОВОЙ ДЕФОРМАЦИИ ПРИ НАЛОЖЕНИИ КРУЧЕНИЯ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ.

Заворотнев Ю.Д.¹, Страумал Б.Б.², Томашевская Е.Ю.³

¹Донецкий физико-технический институт им. Галкина А.А. Донецк, ДНР

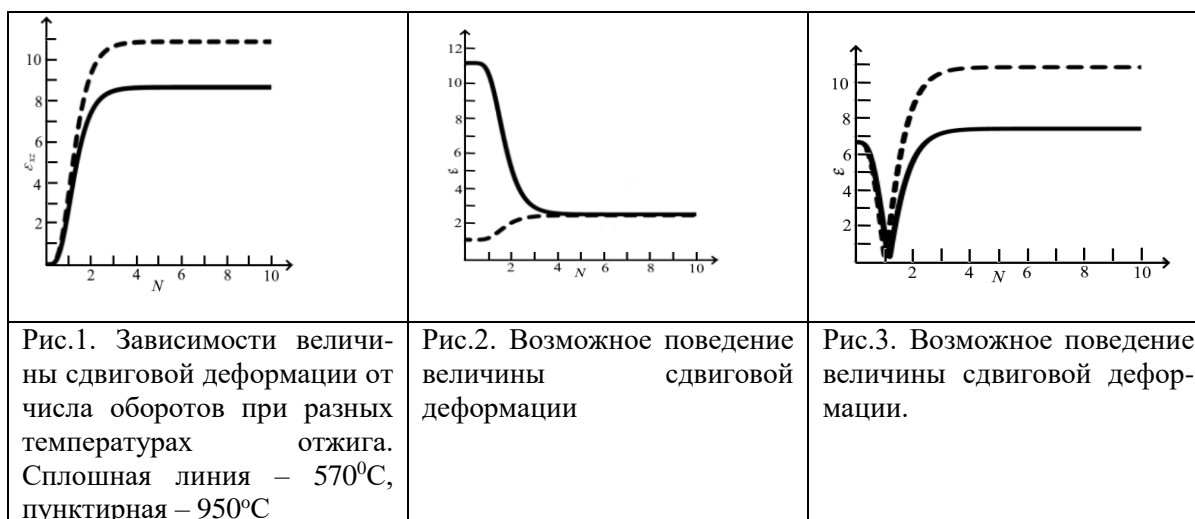
²Институт физики твердого тела РАН им. Ю.А. Осипьяна, Черноголовка, РФ

³Донецкий национальный университет экономики и торговли

им. Михаила Туган-Барановского. Донецк, ДНР

zavorotnev.yurii@mail.ru

В статье [1] экспериментально и теоретически рассмотрены поведения размера элементарной ячейки двухкомпонентных соединений Cu-Ag, Cu-Sn, Cu-Co при наложении кручения под высоким давлением (КВД) и подтверждено наличие конечного стационарного состояния. В настоящей работе рассмотрено взаимодействие микроскопических и макроскопических (вторичных) ПП - компоненты симметричного тензора деформации (в данном случае ε_{xz}). Неравновесный термодинамический потенциал был построен на основе целого рационального базиса инвариантов для векторов и тензоров второго ранга.



В случае однородного распределения деформации в образце рассмотрены ситуации: 1) в полученных образцах при любой температуре отжига отсутствует сдвиговое напряжение (рис.1); 2) величина ε_{xz} меняется при изменении температуры закалки ввиду наличие взаимодействия со структурным параметром порядка (рис.2); 3) совместное воздействие ПП и момента вращения на сдвиговую деформацию (рис.3). Разные максимумы обусловлены зависимостью крутящего момента от температуры закалки. Кривые на рис.2 повторяют поведение первичного ПП. В случае 3 (рис.3) ввиду избыточного напряжения при $M=0$, при малых значениях КВД в образце происходит частичное снятие величины первичной сдвиговой деформации. При этом напряжение и величина ε_{xz} уменьшаются, а затем имеет место их рост и переход в стационарной состоянии.

[1] B.B Straumal, A. R. Kilmotov, Anna Korneva, P. Zieba, Yuri Zavorotnev, Leonid Metlov, Olga Popova, Brigitte Baretzky. Crystals. 11 (2021) 766.

МОЛЕКУЛЯРНАЯ АГРЕГАЦИЯ ФТАЛОЦИАНИНА АЛЮМИНИЯ

Клименко И.В.¹, Астахова Т.Ю.¹, Тимохина Е.Н.¹, Лобанов А.В.^{1,2}

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Москва, Россия, *inna@deom.chph.ras.ru*

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия

Фталоцианины (Фц), как объекты исследования, в последнее годы вызывают огромный интерес благодаря постоянному расширению областей их применения. Они, в частности, используются в качестве фотосенсибилизаторов (Фс) в фотодинамической терапии, механизм действия которой основан на способности Фс избирательно накапливаться в тканях-мишенях и при локальном воздействии излучения определенной длины волны генерировать синглетный кислород, который играет определяющую роль в гибели злокачественных клеток. Однако наличие у Фц гидрофобных свойств, приводящих к образованию нефлуоресцирующих агрегатов и снижению фотодинамической активности [1], препятствует их широкому применению в различных фармакологических композициях.

При разработке способов контроля над агрегационным состоянием Фц необходимо понимание механизмов межхромофорного взаимодействия, приводящего к самотушению возбужденных состояний в агрегатах.

В данной работе процесс агрегации фталоцианина алюминия (AlClФц) в водных и водно-органических средах изучали как квантово-механическими теоретическими расчетами, используя теорию функционала плотности (метод DFT) и пакет программ для квантово-химических расчетов ORCA 4.2.1, так и экспериментальными методами оптической абсорбции и флуоресцентной спектроскопии. Рассчитаны структуры AlClФц в мономерном и димеризованном (Н- и J-агрегаты) состояниях в газовой фазе и в средах N, N-диметилформамид (ДМФА) и ДМФА-вода, а также спектры поглощения и флуоресценции мономерной молекулы и Н- и J-агрегатов AlClФц в средах ДМФА и ДМФА-вода. Расчеты показали практически полное совпадение полученных данных с экспериментом.

Все результаты демонстрируют зависимость фотофизических параметров AlClФц от соотношения мономер/димер в растворе, которое определяется концентрацией AlClФц и воды в системе. Результаты исследования позволяют создать предпосылки для научного прогнозирования и контроля на молекулярном уровне межмолекулярных взаимодействий Фц в органических и водно-органических средах.

Исследование выполнено в рамках Государственного задания ИБХФ РАН (№ гос. регистрации 01201253304). Расчеты выполнены с использованием вычислительных ресурсов МСЦ РАН.

1. I.V. Klimenko, E.A. Trusova, A.N. Shchegolikhin, et al. // Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures. 2022. – V. 30 – № 1. –P. 133-139.

ГИБРИДЫ ФТАЛОЦИАНИН – ГРАФЕН: ПОЛУЧЕНИЕ, ИЗУЧЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

Клименко И.В.¹, Трусова Е.А.², Лобанов А.В.^{1,3}

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, Москва, Россия, *inna@deom.chph.ras.ru*

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук, Москва, Россия

³Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, Россия

Наноматериалы на основе углерода (нанотрубки, фуллерены, графен), благодаря своим выдающимся физико-химическим свойствам, вызывают огромный интерес при использовании их в фотовольтаике, а также при производстве биосенсоров и биосовместимых композитных материалов. Появляются работы о возможности использования графена и его производных в качестве компонента гибридных систем на основе тетрапиррольных соединений для получения фотосенсибилизирующих веществ [1,2]. В зависимости от состава таких гибридных систем тетрапирролы, в том числе фталоцианины (Фц), могут находиться в мономолекулярной форме или образовывать молекулярные агрегаты различных типов. Для эффективного использования Фц в биомедицинских приложениях в качестве фотосенсибилизаторов принципиально важно присутствие Фц в мономолекулярной форме, позволяющей запускать механизм триплет-триплетного переноса энергии на кислород, что приводит к фотодинамическому повреждению целевых биологических структур.

В данной работе мы получили и исследовали с помощью спектральных методов гибридные системы на основе фталоцианинов цинка и алюминия (ZnФц AlClФц) и суспензии бескислородного графена, полученного сонохимическим методом в среде *N,N*-диметилформамид (ДМФА) – вода ($C_{\text{ДМФА}}=4.7\%$ об.), а также провели их качественное и количественное сравнение.

Полученные данные свидетельствуют об отсутствии агрегации Фц в присутствии суспензии графена.

Таким образом, графен предотвращает агрегацию ZnФц и AlClФц и стабилизирует их в фотохимически активной мономерной форме, что придает комплексам Фц - графен свойства, необходимые при использовании его в качестве платформы для векторной доставки лекарств и ранней диагностики.

Исследование выполнено в рамках Государственного задания ИБХФ РАН (№ гос. регистрации 01201253304).

1. I.V. Klimenko, A.V. Lobanov, E.A. Trusova, et al. // Russ. J.of Phys. Chem. B. – 2019. – V. 13. – № 6. – P. 964-968
2. I.V. Klimenko, E.A. Trusova, A.N. Shchegolikhin, et al. // Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures. 2022. – V. 30 – № 1. –P. 133-139.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛАСТИЧНОСТИ МЕМРИСТИВНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4\pm d}$

Н.А.Тулина¹, А.Н. Россоленко¹, И.М.Шмыгько¹, И.Ю.Борисенко², А.А.Иванов³

¹*Институт физики твердого тела Российской академии наук, Черноголовка, tulina@issp.ac.ru*

²*Институт проблем микроэлектроники и чистых веществ РАН, Черноголовка, eagle@iptm.ru*

³*Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", Москва*

Одним из ключевых элементов для создания нейроморфных вычислительных систем является мемристор — резистор с памятью, сочетающий в себе функции обработки и хранения информации [1]. Синапсоподобные мемристоры являются правильным компонентом для создания компьютеров подобных мозгу и интеллектуальных машин. Особый интерес представляют изменения резистивного состояния мемристора по биологически правдоподобным алгоритмам, например, LTP (долговременная способность к потенцированию), STDP (spike-timing-dependent plasticity) пластичность, зависящая от времени прихода импульсов или эффекта LIF (leaky integrate and fire). В биологических нейронных сетях обучение достигается через способность синапсов изменять вес, которым определяется эффективность связи нейронов (синаптическая пластичность) [2]. Несмотря на то, что в мемристивных структурах на основе: $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$, $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{BiO}_3$, $\text{Nd}_{1.86}\text{Ce}_{0.14}\text{CuO}_4$ - продемонстрирован биполярный эффект резистивных переключений (БЭРП) [3], возможность задания промежуточных состояний (пластичность) не была исследована. В данной связи основной целью настоящей работы было изучение пластичности мемристоров на основе $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ (NCCO). Изучалась возможность регулирования резистивных метастабильных состояний мемристивных планарных структур на основе NCCO эпитаксиальных пленок по определенным протоколам исследований. Мы изучали динамические эффекты БЭРП в мемристивных планарных гетероструктурах на основе с-ориентированных эпитаксиальных пленок высокотемпературного сверхпроводника NCCO. В наших предыдущих работах было показано, что ключевым фактором обратимого и воспроизводимого эффекта резистивных переключений в исследованных гетероструктурах является высокорезистивное состояние, которое является полупроводниковым с локализованными носителями (вакансии кислорода). Используя определенные протоколы импульсных испытаний. в работе исследованы и наблюдаются эффекты LTP пластичности мемристивных структур на основе эпитаксиальных пленок NCCO. Многоуровневый характер и возможность регулировать времена переключений характеризуют пластичность этих устройств в качестве элементов памяти для нейроморфных приложений в спайковых нейросетях.

Работа поддержана в части государственных заданий Института Физики твердого тела РАН, Института проблем микроэлектроники и особо чистых материалов РАН

Литература

1. Mikhaylov A, Pimashkin A, Pigareva Y, et al. // Front Neurosci. - 2020. - V. 14. P. - 358.
2. Andy Thomas. // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2013 – V. 46. P 093001-093013.
3. Tulina, N.A., Ivanov, A.A. // J Supercond Nov Magn. - 2020. - V. 33. - P. 2279 – 2286.

СРАВНЕНИЕ МЕТОДОВ ИЗОБРАЖЕНИЯ МИКРООБЪЕКТОВ В СИНХРОТРОННОМ ИЗЛУЧЕНИИ (НА ПРИМЕРЕ САПФИРА С ДЕФЕКТАМИ СТРУКТУРЫ)

Аргунова Т.С.¹, Кон В.Г.², Крымов В.М.¹, Мартюшов С.Ю.³

¹ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, г. С.-Петербург, Россия, argunova@mail.ioffe.ru

²Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

³ТИСНУМ, г.Троицк, г.Москва, Россия

Излучению синхротронов 3-го поколения присущи особенности, приводящие к расширению возможностей рентгеновской визуализации. В данной работе представлены результаты совместного применения дифракционных и фазово-контрастных методов визуализации микро-объектов. В качестве последних были выбраны газовые поры в кристаллах сапфира.

Профилированный сапфир находит применение в биомедицине, материаловедении, оптике, фотонике. В частности, ленты используют для изготовления линз и защитных стекол. Базисноограненные ленты могут найти применение в качестве подложек для светоизлучающих диодов высокой яркости, если их структурное качество сравнится с подложками, полученными другими методами. Газовые поры являются характерным дефектом структуры в лентах, выращенных методом Степанова. Поры приводят к генерации дислокаций, формированию малоугловых границ и образованию блочной дислокационной структуры.

До недавнего времени основными методами изображения дефектов в сапфире были рентгеновская топография и оптическая микроскопия [1]. На топограммах изображения пор и дислокаций перекрываются. В то же время относительно новый метод рентгеновского фазово-контрастного изображения на просвет (ФКИ) [2] позволяет наблюдать поры и включения второй фазы отдельно от дислокаций.

В данной работе представлены результаты, полученные в процессе лабораторных и СИ-экспериментов: топограммы и фазовые изображения газовых пор в объеме и ступеней роста на поверхности сапфировых лент. По рентгеновским топограммам выполнен анализ типа и геометрии расположения дислокаций. Для наблюдения источников генерации дислокаций мы воспользовались методом ФКИ.

В отличие от рентгеновской микроскопии и когерентного дифракционного изображения (КДИ) [3], метод ФКИ обладает довольно большим полем зрения. Построены карты распределения дефектов структуры в образцах в целом. При этом высокое разрешение изображений в пределах поля зрения обеспечило наблюдение дефектов на микроуровне. Размеры пор и высота ступеней роста рассчитаны при помощи программы XRWP2 (X-ray Wave Propagation 2D) [4], основанной на теории фазово-контрастного изображения 3D объектов.

В заключение отметим, что новые возможности визуализации микро-неоднородностей в объеме кристаллов позволят понять механизмы образования дефектов и улучшить технологию выращивания совершенных кристаллов.

[1] И.Л. Шульпина, С.И. Бахолдин, и др. Изв. РАН. Сер. физ. **73** 1445 (2009)

[2] Т.С. Аргунова, В.Г. Кон. УФН. **189** 643 (2019)

[3] П.А. Просеков и др. Кристаллография. **66** 843 (2021).

[4] V. Kohn. Available online: <http://xray-optics.ucoz.ru/XR/xrwp.htm>

ДЕФЕКТЫ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ CdWO₄.**Борисенко Е.Б., Колесников Н.Н., Редькин Б.С., Тимонина А.В.***Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна Российской академии наук,
borisenk@issp.ac.ru*

Кристаллы CdWO₄ известны своими сцинтилляционными свойствами с 1950-х годов. Благодаря высокой эффективности детектирования рентгеновских и γ -лучей, радиационной стойкости, слабой зависимости свечения от температуры этот материал широко применяется, особенно в медицинской компьютерной томографии [1]. Эффективность детекторов, в частности, энергетическое разрешение, зависит от структурных дефектов в вольфрамате кадмия. Однако, имеется мало сведений о дефектах в этих кристаллах. Известно об образовании трещин при охлаждении слитков, при микроиндентировании [2], исследовались поры, дислокационное травление по плоскости спайности показало наличие полных дислокаций, системы скольжения (100) \langle 001 \rangle [3]. Для моноклинных кристаллов CdWO₄ характерна двухслойная плотнейшая упаковка типа гексагональной с плоскостью слоев, параллельной (100).

В данной работе методом химического травления исследованы выходы дислокаций на торцевую грань: плоскость спайности (010), и на перпендикулярные ей грани. В первой серии образцов ориентация вертикальных граней, определенная по лауэграммам, была (100) и (001), а во второй серии образцов грани были развернуты на 10-15° вокруг оси *b*. Оказалось, что ямки травления расположены в рядах [001] и [100], соответственно, на гранях (100) и (001) и близких к ним. Также в образцах на вертикальных гранях, особенно отчетливо во второй серии образцов, видны ямки с геликоидальной поверхностью. После отжига в печи на воздухе при $T = 600^\circ\text{C}$ в течение 2 часов плотность дислокаций уменьшается, большая часть геликоидальных ямок исчезает, выявляются ограниченные прямоугольные ямки.

Показано, что геликоидальные дислокации, которые образовались в результате диссоциации полных дислокаций, могут быть двойниющими при полюсном механизме образования двойника [4]. Очевидно, эти дислокации участвуют в образовании механических двойников в CdWO₄ обнаруженных нами в [5]. Вид ямок травления в кристаллах после отжига указывает на образование полных дислокаций взамен частичных, при ликвидации связанных с ними дефектов, состоящих из частичных дислокаций и ограниченных ими дефектов упаковки.

Литература

1. Michail C., Koukou V., Martini N., Saatsakis G., Kalyvas N., Bakas A., Kandarakis I., Fountos G., Panayiotakis G., Valais I. // Crystals. 10 2020. – 10. – No. 429.- p.-1-16. doi:10.3390/cryst10060429.
2. Sabharwal S.C., Sangeeta // Journal of Crystal Growth. 2000. -216. - p. -535-537.
3. Nazarenko B. P., Baumer V. N., Dolzhenkova E. F., Kosmyna M. B // Inorganic Materials. 2005. – 41. – No. 10- p. -1114–1117. doi: 0020-1685/05/4110-1114.
4. Новиков И. И., Розин К. М. / Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. М.: Металлургия. 1990. 336 с.
5. Borisenko E., Redkin B., Simonov S., Kolesnikov N. // J. of Crystal Growth. – 2022. 599126890. https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2022.126890.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ОБРАЗОВАНИЯ И РОСТА НАНОРАЗМЕРНЫХ ДЕФЕКТОВ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ НАГРУЖЕНИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА В НАНОСЕКУНДНОМ ДИАПАЗОНЕ

Махмудов Х. Ф.¹, Мамалимов Р. И.¹, Щербаков И. П.¹

¹*ФТИ им А. Ф. Иоффе, Политехническая, 26, Санкт-Петербург, 194021,
Российская Федерация, E-mail: h.machmoudov@mail.ioffe.ru*

В процессе разрушения твердого тела образуются наноразмерные трещины, которые проявляются как вторичные эффекты [1,2]. Одним из основных видов механического воздействия, оказываемого на горную породу с целью её разрушения, является ударный (импульсный) процесс. Интересным в данной работе представляется изучение физико-механической природы трещинообразования во время такого рода воздействия. Считается, что процесс разрушения горных пород начинается с образования нанометровых трещин с дальнейшим их слиянием в более крупные по размеру [3]. Актуальным является изучение механизма образования и роста нанотрещин в приповерхностных минеральных нанослоях. Регистрация и анализ вспышек люминесценции позволили впервые изучить динамику образования зародышевых нанотрещин. Динамика образования "зародышевых" нанотрещин впервые была получена в спектрах фрактोलюминесценции (ФЛ), она представляет собой набор сигналов длительностью ~50 нс (наносекунд). Предполагается, что сигналы ФЛ возникают при прорыве барьеров, препятствующих перемещению дислокаций по плоскостям скольжения, и образовании мельчайших - "первичных" нано трещин.

Также с помощью метода ударного воздействия исследовано механическое разрушение приповерхностных слоёв гранитов, нефелина, олигоклаза и альфа-кварца. При разрушении данных пород и минералов возникают наноразмерные дефекты, которые можно наблюдать с помощью ФЛ. Предполагается, что источником возникновения ФЛ в основном являются разорванные межатомные Si–O связи. На стадии начальной деформации образцов разрыву химических связей предшествует движение дислокаций. Обнаружено, что сигналы ФЛ состоят из отдельных импульсов, соответствующие нанотрещинам определённого размера. Временная зависимость распределения энергии сигналов ФЛ описывается степенной функцией. Сигналы акустической эмиссии (АЭ) коррелируют с ФЛ.

Литература

1. Махмудов, И.П. Щербаков. Метод фрактोलюминесценции и наносекундная динамика импульсов люминесценции, геоматериалов под влиянием ударных волн / Х.Ф. // Сборник тезисов VII Международной научно-практической конференции «Инновации и перспективы развития горного машиностроения и электромеханики: IPDME-2020». – 2020. – С. 707-712.
2. Shcherbakov I, Makhmudov Kh. The Mechanism of Destruction Under the Influence of Shock Waves. Preprints 2021, 2021100047 (doi: 10.20944/preprints202110.0047.v1). <https://www.preprints.org/manuscript/202110.0047/v1>
3. Щербаков И.П., Веттегренъ В.И., Мамалимов Р.И., Махмудов Х.Ф. Журнал технической физики. 2017. Т. 87. № 8. С. 1182-1184. DOI: 10.21883/JTE2017.08.44724.2075

АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПОРОШКОВ ЭРБИЯ, ПРОШЕДШИХ ОТЖИГ ПРИ ТЕРМИЧЕСКОМ ЛЕГИРОВАНИИ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

Хамзин Э. Х., Нефедов С. А., Артемьев Д. Н., Латухина Н. В.

*Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П.
Королева, Самара, Россия, Elkhan.k.khamzin@gmail.com*

В данной работе представлено атомно-молекулярное и топологическое описание соединений эрбия, полученных в процессе температурного отжига при легировании образцов пористого кремния. Представлены расшифрованные спектры дифракции рентгеновского излучения и комбинационного рассеяния света порошков эрбия.

Порошок $\text{Er}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ использовался для изготовления люминесцирующих кремниевых структур [1,2]. На поверхность пористого кремния наносили водно-спиртовой раствор. Затем проводился высокотемпературный отжиг. В процессе температурного легирования образовалась новая фаза порошка эрбия. Рентгеновская съемка порошков до и после отжига проводилась в сканирующем режиме на дифрактометре, а структуру молекулярных связей порошков эрбия анализировалась спектроскопией комбинационного рассеяния света (рис. 1 а б).

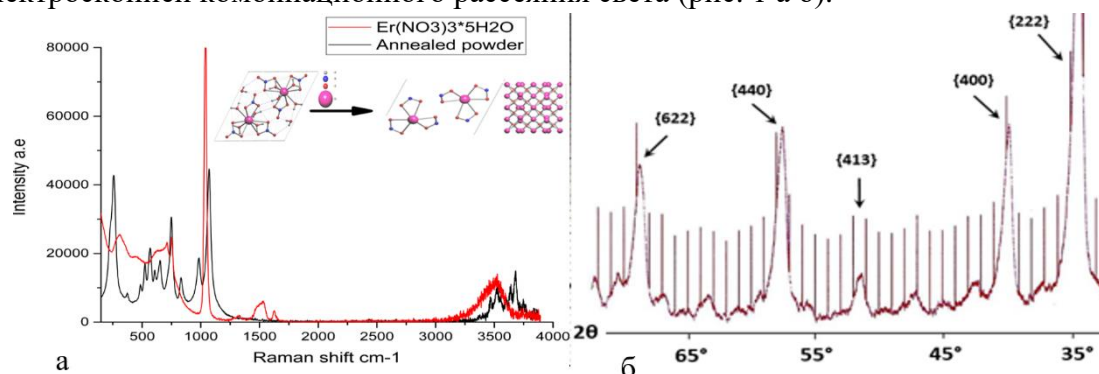


Рис. 1 Структурное представление порошков эрбия а) Спектры рамановского рассеяния б) Рентгеновская дифрактограмма порошка Er_2O_3

При атомно-молекулярном рассмотрении порошков эрбия рентгеновская дифракция показала, преобладании кубического оксида эрбия в отожжённой фазе. Спектроскопия Рамановского рассеяния показала наличие следовых концентраций кремния и безводной соли нитрата эрбия. Выявление закономерного смещения спектральных линий нитридной, амидной и оксидной связей может быть учтено при описании других солей азотной кислоты или анализе люминесцентных оксидов.

Топологический анализ показал, что с фазовым превращением соли эрбия в оксид меняется характер ионной проводимости в более выгодное состояние для светоизлучательных кремниевых структур.

Литература

1. Koptev M. Yu., and etc. All-fiber high-power erbium-doped laser system generating optical pulses with a duration of 200 μs to 5 ms for fractional photo-rejuvenation// Applied Optics. - 2022. - №16. - pp. 4851-4856.
2. Krasilnik Z. and etc. Erbium Doped Silicon Single- and Multilayer Structures for LED and Laser Applications Mater. Materials Research Society Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 866 - 2005

МОРФОЛОГИЯ, СТРУКТУРА И ГАЗОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА МАРГАНЕЦСОДЕРЖАЩИХ КРЕМНИЙ-УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК

Михайлова Т.С., Мясоедова Т.Н., Kalusulingam R.

Южный федеральный университет, г. Таганрог, Россия, tmihaylova@sfedu.ru

Кремний-углеродные пленки – это материал, который может быть использован в микроэлектронике для создания функциональных элементов различных устройств. Они обладают повышенной коррозионной и износостойкостью, низким коэффициентом трения, высоким значением твердости покрытия, высокой адгезией к поверхности подложки, химической стабильностью и другими [1, 2]. Дополнительное введение в структуру кремний-углеродных пленок атомов металлов позволяет обеспечить заданные значения электропроводности [3], что способствует их использованию при создании сенсоров газов.

В данной работе кремний-углеродные пленки, модифицированные атомами марганца, были получены простым в реализации методом электрохимического осаждения, подробно описанным в работе [4]. Также в указанной работе было показано, что марганец встраивается в структуру кремний-углеродной пленки с образованием соединений с кремнием и углеродом.

Для создания сенсорных структур, обладающих газовой чувствительностью к оксиду углерода и метану, кремний-углеродные пленки, модифицированные марганцем, были осаждены на диэлектрические подложки с группами электродов из проводящего материала (меди) с тонким зазором. Морфология и структура кремний-углеродных пленок исследовались до и после воздействия целевыми газами в диапазоне температур 30-200 °С методами растровой электронной микроскопии (РЭМ) и рамановской спектроскопии, соответственно. Кинетика адсорбции молекул газов на поверхности газочувствительного материала была описана с помощью модели Еловича, применимой при описании адсорбции в гетерогенных системах. РЭМ-изображения пленок показали, что при эксплуатации сенсора наблюдается некоторое нарушение их изначально упорядоченной гранулированной структуры: на поверхности пленок появляются разрывы. Также наблюдается укрупнение кристаллитов. Структура образцов является многофазной и характеризуется наличием преимущественно гексагональной фазы 6H SiC политипа с включениями ромбоэдрической фазы 15R SiC, обнаружено наличие Si-C связи, отвечающей за наличие аморфной фазы карбида кремния. Также для пленок характерно наличие D и G пиков неупорядоченного углерода, интенсивность которых значительно возрастает у образцов, находившихся под воздействием газов. Построение модели Еловича показало разный механизм реакции поверхности пленок на угарный газ и метан (линейный и нелинейный рост энергии активации, соответственно).

Полученные результаты могут быть использованы при создании сенсоров газов с управляемыми параметрами.

Литература

1. Su, C.H. // Thin Solid Films. – 2006. – Vol. 498, № 1. – P. 220-223.
2. Fanchini, G. // Diamond and Related Materials. – 2003. – Vol. 12, № 3. – P. 900-904.
3. Dorfman, V.F. // Thin Solid Films. – 1992. – Vol. 212. – P. 267-273.
4. Mikhailova, T.S., Grigoryev M.N., Myasoedova T.N. // Journal of Physics: Conference Series. – 2019. – Vol. 1410.

**МИНИМАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ КИТАЕВСКОГО МАТЕРИАЛА
BaCO₂(AsO₄)₂****Максимов П.А.^{1,2*}, Ушаков А.В.², Пчелкина З.В.^{2,3}, Ли Й.⁴, Уинтер С.М.⁵,
Стрельцов С.В.^{2,3}**¹*Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия,*²*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия,*³*Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия,*⁴*Department of Applied Physics and MOE Key Laboratory for Nonequilibrium Synthesis and Modulation of Condensed Matter, School of Physics, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, China,*⁵*Department of Physics and Center for Functional Materials, Wake Forest University, NC 27109, USA,**maksimov@theor.jinr.ru

Используя два ab initio подхода, мы анализируем электронную структуру и извлекаем эффективные обменные спиновые модели для BaCO₂(AsO₄)₂, гипотетического кандидата для модели Китаева [1,2]. Оба метода показывают, что доминирующие прямые перескоки не приводят к сильным китаевским взаимодействиям, что затрудняет стабилизацию спиновой жидкости. В результате, мы представляем простую обменную модель с тремя параметрами для описания взаимодействий нижнего дублета на решетке “пчелиные соты” в BaCO₂(AsO₄)₂. Примечательно, что для стабилизации экзотического состояния “двойной зигзаг” необходимы как изотропные, так и анизотропные взаимодействия третьих соседей. Эта модель подтверждается наблюдающимся в ab initio неожиданно большим перескоком третьих соседей.

1. A. Kitaev, Annals of Physics 321, 2 (2006), January Special Issue
2. H. Liu, J. Chaloupka and G. Khaliullin, Phys. Rev. Lett. 125, 047201 (2020)

ВЛИЯНИЕ ТЕРМОРАДИАЦИОННОГО МОДИФИЦИРОВАНИЯ НА ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КОМПОЗИТАХ НА ОСНОВЕ ПТФЭ

Садовская Н. В.^{1,2}, Авиллов А. С.¹, Хатилов С. А.²

¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия,
nataly_sadovska@mail.ru

²ООО «НПП «Арфлон», Москва, Россия, sakh@mail.ru

Среди полимеров ПТФЭ является лучшим антифрикционным материалом. Вместе с тем легкость деламации ПТФЭ в зоне трения приводит к высокому массовому и линейному износу. Поэтому в мировой практике используют в качестве антифрикционных материалов композиты на основе ПТФЭ. Одной из проблем композитов ПТФЭ является их пористость, которая возникает из-за отсутствия смачиваемости частиц наполнителя полимерной матрицей ПТФЭ. Ранее [1] нами было показано, что одновременное термо (выше 330°C) и радиационное (гамма-квантами ⁶⁰Со дозой 200 кГр) воздействие ведет к усилению адгезии полимера к частицам наполнителя, что иллюстрировалось данными растровой электронной микроскопии (РЭМ). На электронных изображениях был виден отчетливо переход от пористой к плотной структуре в терморadiационно-модифицированном (ТРМ) композите ПТФЭ, в которой исчезает воздушный промежуток между полимерной матрицей и поверхностью наполнителя (рис. 1а, б). В настоящей работе проведен термический анализ композитов ПТФЭ с различными порошковыми наполнителями (углеволокно, кокс, стекловолокно) при содержании 5–30 масс. % методом ДСК с целью экспериментального подтверждения усиления адгезионного взаимодействия между частицами наполнителя и полимерной матрицей, вызванного ТРМ.

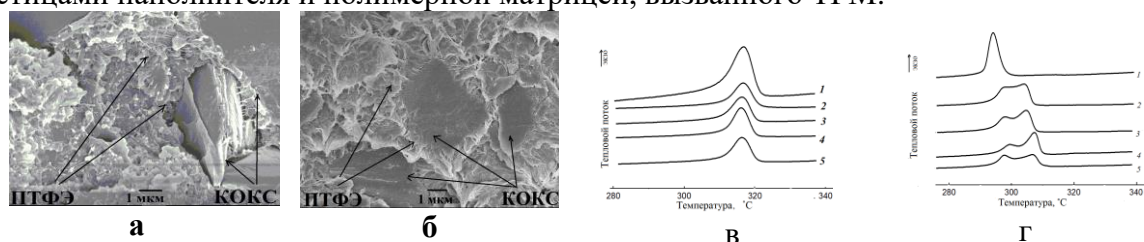


Рис. 1. РЭМ-изображения (а, б) и термограммы кристаллизации (в, г) исходных (а, в) и ТРМ (б, г) композитов ПТФЭ с различным содержанием кокса, масс. %: 1 – 0, 2 – 5, 3 – 10, 4 – 20, 5 – 30. Доза модифицирования 200 кГр.

Показано, что ТРМ оказывает значительное влияние на характеристики фазовых переходов в композитах ПТФЭ. В исходных композитах независимо от типа и концентрации наполнителя наблюдается один пик кристаллизации (рис. 1в), свидетельствующий о существовании одной кристаллической фазы. В ТРМ-композитах появляется второй пик (рис. 1г). Появление второго пика объясняется усилением адгезионного взаимодействия полимера с частицами наполнителя и формированием второй кристаллической фазы вблизи поверхности наполнителя, отличающейся температурой плавления.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Литература

1. Садовская Н. В., Обвинцев А. Ю., Хатилов Р. С., Селиверстов Д. И., Хатилов С. А. // Поверхность. Рентген-, синхротрон. и нейтрон. исслед. – 2016 – № 91. С. 1–8

ДОЗИМЕТРИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ФОСФАТНЫХ И ФТОР-ФОСФАТНЫХ МАТРИЦ

Келлерман Д. Г.¹, Акулов Д. А.¹, Калинин М. О.¹, Медведева Н. И.¹, Абашев Р. М.², Сюрдо А. И.²

¹Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия, kellerman@ihim.uran.ru

²Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Россия

Разработка новых материалов для создания высокоэффективных детекторов ионизирующего излучения, основанных на явлениях термически или оптически стимулированной люминесценции, является важной задачей. В данной работе в качестве оптических матриц для дозиметрического применения рассмотрены литий магниевый фосфат LiMgPO_4 и фторофосфат $\text{Li}_9\text{Mg}_3[\text{PO}_4]_4\text{F}_3$. Для их получения использованы твердофазный и микроволновый методы. Показано, что обе эти фазы являются широкозонными полупроводниками с $E_g \approx 7$ эВ и 6 эВ соответственно. С помощью первопринципных расчетов определены энергетические уровни дефектов, которые служат ловушками при ионизирующем облучении. Существование дефектов в обеих фазах подтверждено методом ЭПР. Установлены спектральный состав и температурный интервал термически стимулированной люминесценции (Рис. 1).

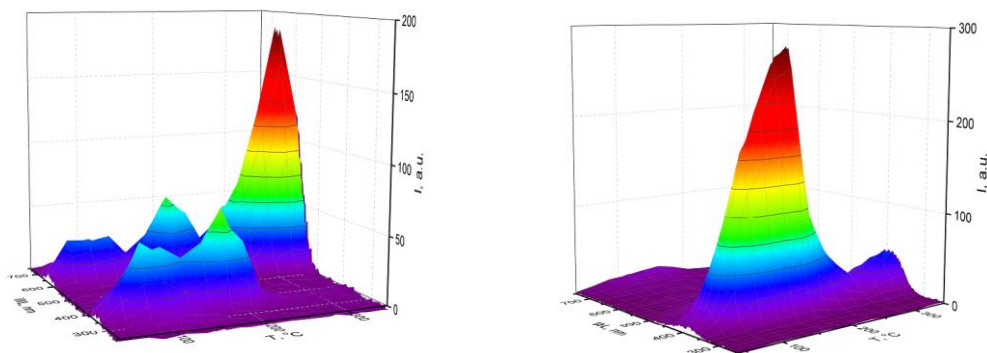


Рис. 1. Спектры термолюминесценции LiMgPO_4 и $\text{Li}_9\text{Mg}_3[\text{PO}_4]_4\text{F}_3$

Проведенные исследования показали, что интенсивность термолюминесцентного сигнала фосфатной и фтор-фосфатной матриц можно заметно повысить за счет ускорения кинетики образования целевого материала, улучшения контакта между зернами, а также ограничения контакта частиц материала с атмосферой отжига. Флюсовый, микроволновый, гидротермальный и другие методы синтеза позволили ослабить рассеяние на границах зерен и увеличить прозрачность материала в ближней УФ области.

Обнаружено, что РЗ элементы, которые вводятся в матрицы для усиления термолюминесценции, можно разделить на две группы: входящие в первую группу высвечиваются сами, а входящие во вторую усиливают сигнал матриц. Предложена и обоснована модель переноса энергии от редкоземельного элемента к дефектам матрицы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, Проект 20-13-00121

УНИВЕРСАЛЬНОСТЬ АНДРЕЕВСКИХ СОСТОЯНИЙ МНОГОТЕРМИНАЛЬНЫХ SNS – КОНТАКТОВ

А.Ф. Посадский^{1,2,+}, А.Г. Семёнов^{1,2,3,++}

¹Физический институт РАН им. П.Н. Лебедева, Москва, Россия

²Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет), Москва, Россия

³Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
Москва, Россия

⁺posadskij.af@phystech.edu, ⁺⁺semenov.ag@mipt.ru

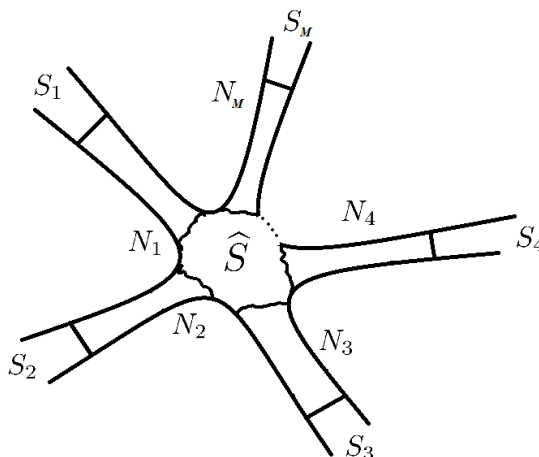


Рис. 1. Схематическое изображение M – терминального джозефсоновского контакта.

В работе рассматривается многотерминальный джозефсоновский контакт (МДК) с произвольным числом терминалов M , в центре которого находится примесь, описываемая некоторой матрицей рассеяния \hat{S} (рис. 1). Показано, что в определённых приближениях спектры андреевских состояний полностью определяются транспортными характеристиками структуры и не зависят от диагональных фаз матрицы рассеяния. Данный факт означает, что спектры МДК обладают некоторой универсальностью: они не меняются при любом изменении фаз отражения от примеси.

Литература

1. *Josephson B.D.* Possible new effects in superconductive tunnelling // *Phys. Lett.* 1962. V. 1. P. 251
2. *П. Де Жен.* Сверхпроводимость металлов и сплавов, Москва, Мир, 1968.
3. *Li-Fu Chang, Bagwell P.F.* Ballistic Josephson-current flow through an asymmetric superconductor — normal-metal — superconductor junction // *Phys. Rev. B.* 1994. V. 49. P. 15853.
4. *Bagwell P.F.* Suppression of the Josephson current through a narrow, mesoscopic, semiconductor channel by a single impurity. // *Phys. Rev. B.* 1992. V. 46. P. 12573.
5. *Hong-Yi Xie, Vavilov M.G., Levchenko A.* Topological Andreev bands in three-terminal Josephson junctions. // *Phys. Rev. B.* 2017. V. 96. P. 161406-1.

ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИЕ ВОЛНЫ В СТРУКТУРАХ С НАНОЗАБОРОМ

Соколов А.А.

*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт автоматики и электрометрии
Сибирского отделения Российской академии наук (ИАиЭ СО РАН),
г. Новосибирск, Российская Федерация,
SokolovAA@iae.nsk.su*

В современной микроэлектронике наиболее интенсивно развивающимся сектором являются микроэлектромеханические системы (МЭМС). В ряде работ предлагается для создания МЭМС большой удельной механической мощности использовать систему «подвижный электрод – нанометровый зазор – тонкая пленка материала с большим значением диэлектрической проницаемости – неподвижный электрод» [1-2]. Описанная структура схематично изображена на рис.1. Подвижный электрод (ПЭ) представляет из себя металлическую пластину, опирающуюся на неровности диэлектрика. Прижим ПЭ осуществляется электростатическими силами.

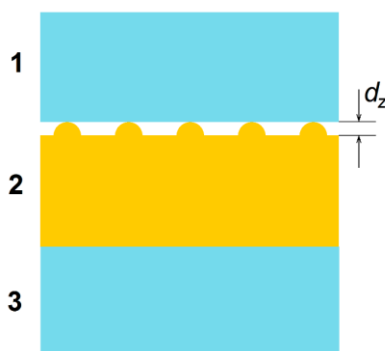


Рис.1. Система «подвижный электрод (1) – нанометровый зазор (d_z) – пленка материала с большим значением диэлектрической проницаемости (2) – неподвижный электрод (3)».

Ключевым моментом изготовления MEMS большой удельной мощности является создание тонкого межэлектродного зазора, в котором осуществляется перемещение ПЭ [1]. Введение в межэлектродный зазор материала с большим значением диэлектрической проницаемости дает возможность увеличить электрическое поле в зазоре, без возникновения пробоя.

В описанной структуре могут возникать бегущие волны (бронзоны), причем из-за нелинейностей [3], между этими возбуждениями существует взаимодействие.

Литература

1. E.G. Kostsov, Electromechanical energy conversion in the nanometer gaps, Proc. SPIE Vol. 7025, 70251G (Apr. 29, 2008)
2. I.L. Baginsky, E.G.Kostsov, “Nanometer gap in electromechanical converters – a way to achieve an extremely high energy density”, Micromashines, Vol. 10, no.11,746, 12 pp., November 2019
3. Piotr Skrzypracz, Dongming Wei, Daulet Nurakhmetov, Eduard G. Kostsov, Alexei A. Sokolov, Madi Begzhigitov, Grant Ellis. Analysis of dynamic pull-in voltage and response time for a micro-electro-mechanical oscillator made of power-law materials // Nonlinear Dyn. (2021) 105:227–240 <https://doi.org/10.1007/s11071-021-06653-3>

СИНХРОНИЗАЦИЯ ТЕПЛОВЫХ ОСЦИЛЛЯЦИЙ НАНОВКЛЮЧЕНИЙ ЖИДКОГО РЬ НА ОДНОЙ ДИСЛОКАЦИИ В АІ МАТРИЦЕ

Прокофьев С. И.

Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия, prokof@issp.ac.ru

На основе in-situ ПЭМ наблюдений изучена динамика продольной составляющей теплового движения 12 нановключений жидкого РЬ на закрепленном дислокационном сегменте в сплаве $Al_{99.5}Pb_{0.5}$ и влияние на нее температуры в интервале 442°C - 497°C. С точки зрения физики, исследуемая система является квази-одномерным ансамблем глобально взаимодействующих неидентичных хаотических осцилляторов, для которых можно ожидать фазовую синхронизацию, при этом, амплитуда осцилляций остается хаотической [1]. Как было показано ранее, тепловое движение таких включений представляет собой их хаотические осцилляции вблизи линии дислокации [2, 3]. Взаимодействие включений на закрепленном сегменте дислокации приводит к их коллективным пространственно коррелированным тепловым осцилляциям, что ранее было показано для двух [4] и четырех включений [5] на дислокационных сегментах. Анализ частотных спектров фазы, полученных из зависимостей продольных координат включений на дислокации от времени, показал высокую степень синхронизации тепловых осцилляций включений. Показано, что включение, связанное с дислокационным узлом, на котором закреплен один из концов сегмента дислокации, является источником внешнего шума, который значительно понижает степень синхронизации тепловых осцилляций ближайших к нему включений. Показано, что повышение температуры также приводит к понижению степени синхронизации, которое наиболее заметно для включений ближайших к включению – источнику внешнего шума. На основании полученных данных предложен механизм десинхронизации тепловых осцилляций включений.

Работа выполнена в рамках госзадания ИФТТ РАН,

Литература

1. Пиковский А., Розенблом М., Куртс Ю. // Синхронизация, фундаментальное нелинейное явление. – М.: Техносфера, 2003.
1. Prokofjev S., Zhilin V., Johnson E., et al. // Def. Diff. Forum. – 2005. – V. 237-240. – P. 1072-1077.
2. Johnson, S. Prokofjev, V. Zhilin, U. Dahmen. // Z. Metallk. – 2005. – V. 96. no. 10. – P. 1171-1180.
3. Prokofjev S.I., Johnson E. // J. Phys. Commun. – 2017. – V. 1. – no. 5. – P. 5. – 055001. – (10 P.).
4. Prokofjev S.I., Johnson E. // Phil. Mag. – 2023. – V. 103. – no. 1. – P. 1-26.

БАЛЛИСТИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ЗОЛОТЫХ НАНОТРУБОК**Созыкина Е. Р.¹, Созыкин С. А.²***Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Российская Федерация, E-mail: ¹sozykinaer@susu.ru, ²sozykinsa@susu.ru*

Современные технологические нормы изготовления электронных устройств делают необходимым учет квантовых эффектов. Среди них можно отметить баллистическую проводимость, возникающую в квазиодномерных объектах, например, золотых нанопроволоках [1]. В работе [1] было показано, что проводимость уменьшается с уменьшением количества атомных рядов, составляющих проволоку. Для золотой линейной атомной цепочки проводимость составляет квант проводимости $G_0 = 2e^2/h$, который соответствует электрическому сопротивлению 12,9 кОм.

В общем случае может существовать несколько каналов проводимости с разной вероятностью прохождения электрона. Эти вероятности, функции пропускания, могут зависеть от приложенной разности потенциалов. Как следствие, проводимость одномерных объектов не всегда пропорциональна.

Теоретически нанотрубки из атомов золота исследовались, в основном, в рамках теории функционала электронной плотности [2-4]. Работ по моделированию их электропроводности нам не известно. В данной работе были построены модели одностенных золотых нанотрубок шести разных диаметров: ОЗНТ (4, 0), (5, 0), (6, 0), (7, 0), (4, 4), (5, 5). Моделирование проводилось в программе SIESTA в приближении GGA (обменно-корреляционный функционал PBE) и использованием DZP базисного набора. Вольт-амперные характеристики золотых нанотрубок рассчитывались входящей в дистрибутив SIESTA программой TBtrans.

Функции пропускания исследованных нанотрубок показывают, что количество каналов проводимости не является постоянным. Как следствие, вольт-амперная характеристика оказывается не строго линейной. Для выявления устойчивости полученных результатов к простейшему дефекту – вакансии, были смоделированы золотые нанотрубки разного диаметра и для них рассчитана зависимость тока от разности потенциалов. Таким образом, был установлен пороговый диаметр нанотрубки, при котором свойства оказываются не восприимчивы к появлению дефекта вакансии.

Литература

1. Takayanagi K., Kondo Y., Ohnishi H. // JSAP Int. – 2001. – V. 3. – № 1. – P. 3-8.
2. Yang X., Dong J. // Phys. Rev. B. – 2005. – V. 71. – P. 233403
3. Manrique D. Zs., Cserti J., Lambert C. J. // Phys. Rev. B – 2010. – V. 81. – P. 073103.
4. Zhang K., Zhang H. // J. Phys. Chem. – 2014. – V. 118. – P. 635-641.

ИЗУЧЕНИЕ ВИХРЕВОГО ДВИЖЕНИЯ В УЗКОМ ЗАЗОРЕ МЕЖДУ ПЛОСКИМИ ДИСКАМИ В СВЕРХТЕКУЧЕМ He-II

П.Г. Селин, А.А. Левченко

*Институт физики твёрдого тела им. Ю.А. Осипьяна РАН
Россия, 142432, Черноголовка, Московская обл., ул. Академика Осипьяна, д. 2
e-mail: selin@issp.ac.ru*

В последнее время во всём мире наблюдается всё больший интерес к проблемам турбулентности. В связи с развитием методов регистрации движения и анализа данных появилась возможность более точной регистрации турбулентности и обработки данных.

В качестве модельных объектов для исследования турбулентности используются вода, жидкий водород, жидкий гелий и другие жидкости. Особый интерес для исследования представляет сверхтекучий гелий, так как в нём возникают квантовые вихри при скоростях выше некоторой критической и изучение свойств которых способствует расширению существующих представлений о физике турбулентных явлений.

Разработана и изготовлена экспериментальная установка для изучения процессов вихревого движения в сверхтекучем гелии в узких зазорах. Установка позволяет проводить прямое наблюдение и видеосъемку процессов, происходящих в He-II при температурах ниже T_λ . Проведенные испытания продемонстрировали влияние скорости вращения дисков на перенормированное значение вязкости жидкости в зазоре между дисками. Это открывает возможности наблюдения и исследования размерного эффекта при уменьшении ширины зазора.

Проведена серия предварительных экспериментов, которые подтвердили возможность регистрации угла отклонения, свободно подвешенного в He-II плоского диска от положения равновесия вследствие передачи углового момента силы, который возникает в жидкости при вращении с заданной скоростью расположенного под ним диска. Угловой момент, порождаемый в He-II вращающимся диском, передается через слой жидкости между дисками к подвешенному над ним свободному диску.

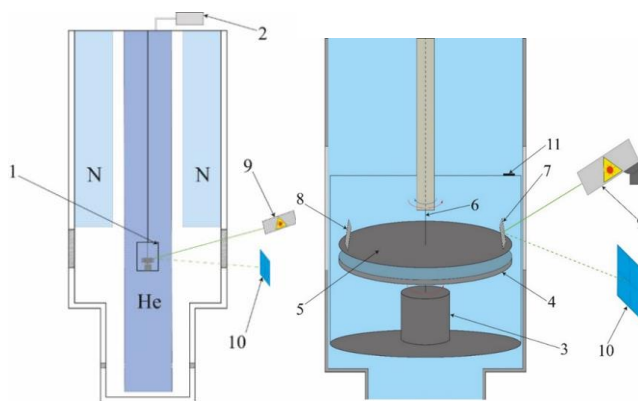


Рис.1. Схема экспериментальной установки. 1 – опоры вставки; 2 – датчик давления насыщенных паров жидкого гелия; 3 – мотор, установленный на неподвижной платформе; 4 – нижний диск, жестко закрепленный на оси мотора; 5 – верхний диск; 6 – нить подвеса; 7 – зеркало; 8 – противовес; 9 – лазер; 10 – позиционный датчик; 11 – полупроводниковый термометр.

Литература

1. Андроникашвили, Э.Л. // ЖЭТФ. 1946. т. 16. вып. 9. С. 780-785.
2. Tabeling P, Zocchi, G., Belin, F., J. Maurer, J., Willaime, H. // Physical Review E. 1996. V.53. №2. PP. 1613-1621. PACS number(s): 47.27.—i, 47.55.Bx, 47.80.+v.
3. Donnelly, R.J., Varengi, C.F. // Journal of Physical and Chemical Reference Data. 1998. V. 27. №1217. PP. 1220-1274. <https://doi.org/10.1063/1.556028>.

БЕЗВОДОРОДНОЕ ГАЗОФАЗНОЕ ОСАЖДЕНИЕ ТАНТАЛОВЫХ ПОКРЫТИЙ НА НОВЫХ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛАХ

Лубнин А.Н., Ладьянов В.И., Файзуллин Р.Р., Трещёв С.Ю.

Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения
Российской Академии наук Ижевск, Россия, qrcad@udman.ru

Танталовые покрытия благодаря высоким защитным свойствам применяются для повышения износо- и коррозионной стойкости, создания промежуточных диффузионных барьеров, подслоев улучшающих адгезию, электрических контактов, резисторов [1]. Метод химического газофазного осаждения (CVD) удобен для осаждения на детали сложной формы. Традиционно CVD танталового покрытия проводится по реакции $2\text{TaCl}_{5(\text{r})} + 5\text{H}_{2(\text{r})} = 2\text{Ta}_{(\text{тв})} + 10\text{HCl}_{(\text{r})}$. Было показано, что в зависимости от материала подложки осаждается покрытие из α или β -тантала. В работе [2] был предложен безводородный метод CVD по реакции: $2\text{TaCl}_{5(\text{r})} + 5\text{Cd}_{(\text{r})} = 2\text{Ta}_{(\text{тв})} + 5\text{CdCl}_{2(\text{r})}$. Отмечается, что использование более сильного восстановителя позволяет увеличить интенсивность процесса. С помощью безводородной технологии CVD на металлических подложках осаждены чистые танталовые покрытия с высокими защитными коррозионными свойствами и высокой прочностью сцепления [3]. В настоящее время большое внимание уделяется изучению углеродных материалов, способам улучшения их стойкости к окислительной атмосфере. Цель данной работы – изучение процессов безводородного CVD танталовых покрытий на графите, терморасширенном графите, графене, фуллерене (C60), углеродных нанотрубках (УНТ).

Получение покрытий проводилось на автоматизированной программно управляемой лабораторной установке CVD при атмосферном давлении (830 °С, 2 ч). Исходными компонентами являлись TaCl_5 (99.99 мас. %) и Cd (99.99 мас. %). Установлено, что на графите, графене, терморасширенном графите происходит осаждение ГЦК и ГПУ фаз на основе тантала, тогда как на C60 и УНТ только ГЦК фаз. Обсуждается кинетика осаждения и структура покрытия в связи со структурой углеродной подложки.

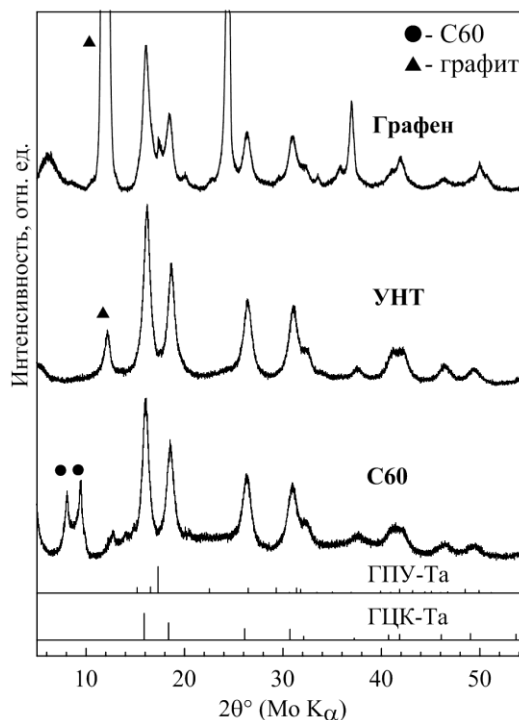


Рис. 1. Рентгеновские диффрактограммы графена, углеродных нанотрубок (УНТ) и фуллерена C60 с осажденным на них танталовым покрытием.

Литература

1. Kodas T.T., Hampden-Smith M.J. The Chemistry of Metal CVD. Weinheim, New York Basel, CamClidge, Tokyo : VCH, 1994. 530 p.
2. Goncharov O.Y., Treshchev S.Y., Lad'yanov V.I., Faizullin R.R., Guskov V.N., Baldaev L.Kh. Inorg. Mater. – 2007. – Т. 53. – Р. 1064–1068.
3. Лубнин А.Н., Ладьянов В.И., Пушкарев Б.Е., Сапегина И.В., Файзуллин Р.Р., Трещёв С.Ю. Поверхность. Рентгеновские, Синхротронные и Нейтронные Исследования. – 2022. – Т. 5. – С. 1–10.

РЕНТГЕНОВСКАЯ КОГЕРЕНТНАЯ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ МИКРОСТРУКТУРЫ ПОЧТИ СОВЕРШЕННЫХ КРИСТАЛЛОВ

В. Г. Кон¹, Т. С. Аргунова²

¹Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

²ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, г. С.-Петербург, Россия, argunova@mail.ioffe.ru

Рентгеновские методы визуализации, использующие яркость синхротронного излучения (СИ) источников третьего поколения с малым эмиттансом, интенсивно развиваются отечественными и зарубежными учеными. Эти методы позволяют проникать в микро- и наноструктуру твердых тел, в том числе почти совершенных кристаллов, благодаря высокой поперечной когерентности СИ. Ранее было показано, что нанофокусировка с помощью планарной составной преломляющей линзы (СПЛ) создает вторичный источник СИ с малым поперечным размером на небольшом расстоянии от объекта [1]. В работе [2] метод рентгеновской микроскопии с использованием нанофокусировки [1] был применен для расчета изображений двумерного фотонного кристалла с периодом 0.5 мкм. В данной работе продемонстрировано возможное применение идентичной идеи – нанофокусировка в сочетании с фазовым контрастом – для изображения микропор в кристаллах в ближнем поле.

Известно, что условие ближнего поля реализуется только на небольшом расстоянии z от образца. Реальный размер D микропоры в монокристалле коррелирует с размером изображения при выполнении условия: $2r_1 \ll D$, где $r_1 = (\lambda z)^{1/2}$ – радиус первой зоны Френеля для длины волны λ . На самом деле, поперечный размер микротрубки ($D \approx 2$ мкм) равен расстоянию между первыми минимумами интерференционной картины для критического расстояния $z_c \approx z/10$ [3]. При этом размер экспериментального изображения очень мал, заметно меньше предела разрешения ПЗС детекторов.

Однако есть другая возможность реализовать режим ближнего поля. В безлинзовом методе фазово-контрастного изображения на просвет (ФКИ) [4] расстояние от образца до детектора z всегда меньше расстояния от источника СИ до образца: $z \ll Z$. При обратном соотношении $z \gg Z$ изображение соответствует условию ближнего поля. В то же время увеличивается размер проекции источника, в результате чего мелкие микропоры не разрешаются методом ФКИ. Для реализации схемы, обладающей высоким разрешением, требуется вторичный источник СИ, который можно создать с помощью СПЛ. В этом случае, свойства изображения практически не зависят от расстояния до детектора z и определяются расстоянием между вторичным источником и объектом. Кроме того, размер изображения намного больше объекта; и ПЗС детектор среднего разрешения вполне подходит для работы в режиме ближнего поля.

Компьютерный эксперимент был выполнен с помощью программы XRWP2 (X-ray Wave Propagation 2D) [5], основанной на теории фазово-контрастного изображения трехмерных объектов. В качестве последних рассмотрены сферические поры в почти совершенных кристаллах сапфира и микротрубки в карбиде кремния.

[1] V.G. Kohn, T.S. Argunova. Phys. Status Solidi B **259** 2100651 (2022)

[2] В.Г. Кон. Кристаллография **67** 892 (2022)

[3] T.S. Argunova, V.G. Kohn. Materials **15** 856 (2022)

[4] Т.С. Аргунова, В.Г. Кон. УФН **189** 643 (2019)

[5] V.G. Kohn. Available online: <http://xray-optics.ucoz.ru/XR/xrwp.htm>

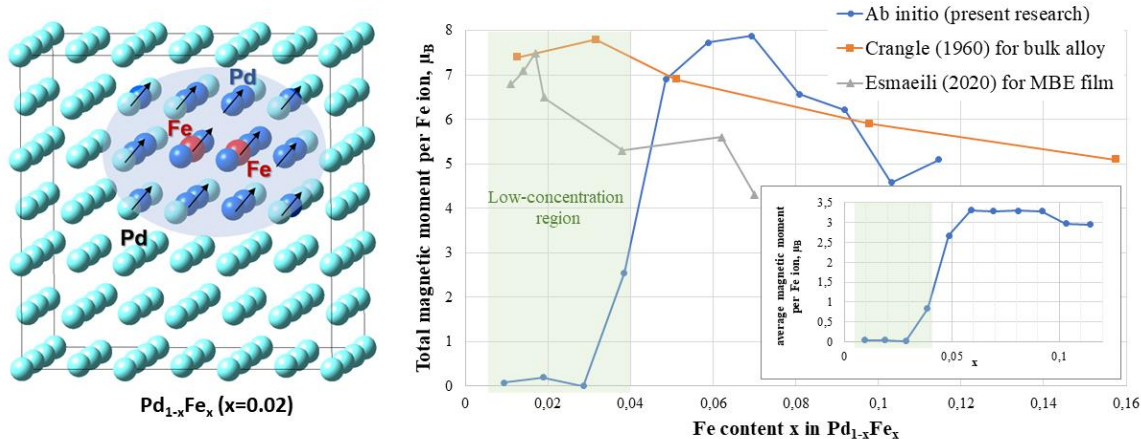
AB INITIO ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ И ЛОКАЛИЗАЦИИ ФЕРРОМАГНИТНОЙ ПРИМЕСИ НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА БИНАРНЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ПАЛЛАДИЯ

Гумарова И. И., Гумаров А. И.

¹Казанский Федеральный Университет, Казань, Россия, *i.priyanzina@gmail.com*

Примесный ферромагнетизм сильно парамагнитного палладия вызывал огромный интерес у теоретиков и экспериментаторов еще в прошлом столетии благодаря тому, что эффективный магнитный момент, приходящийся на одну магнитную примесь, например железа, оказался аномально большим, вплоть до 12 магнетонов Бора [1,2]. Сегодня, возрождение интереса к сплавам Pd-Fe в основном связано с их потенциальным использованием в качестве слабого ферромагнетика в сверхпроводящей магнитной памяти с произвольным доступом (MRAM) на основе джозефсоновских переходов. Несмотря на имеющуюся долгую историю исследований подобных структур, область низких концентраций примесей до сих пор недостаточно изучена. Так, недавно экспериментально были обнаружены новые особенности фазовой диаграммы сплава палладия с железом в области низких концентраций, ≤ 10 ат.% [3,4].

Теоретические расчеты могли бы помочь соотнести новые экспериментальные результаты со старыми работами, а также пролить свет на механизмы образования намагниченности в сплавах палладия. Так, в работе показаны результаты исследований примесного ферромагнетизма в сплавах на основе палладия с помощью расчетов из первых принципов (на основе теории функционала плотности). Впервые было проведено комплексное сравнительное исследование сплавов типа $\text{Pd}_{1-x}\text{A}_x$ при низких концентрациях примеси ($x = 0.01\text{--}0.1$, $\text{A} = \text{Fe}, \text{Co}, \text{Mn}, \text{Ni}, \text{Er}$ и другие). Полученные результаты были соотнесены с экспериментальными данными, которые также представлены в работе. На рисунке представлены результаты для сплава палладия с железом.



Литература

1. Crangle J. // *Philos. Mag.* – 1960. – V. 5. – P. 335-342.
2. Nieuwenhuys G.J. // *Adv. Phys.* – 1975. – V. 24. – P. 515–591.
3. Gumarov A.I., Yanilkin I.V., Yusupov R.V., Kiiamov A.G., Tagirov L.R., Khaibullin R.I. // *Mater. Lett.* – 2021. – V. 305. – Art. 130783.
4. Esmaeili A., Yanilkin I.V., Gumarov A.I., Vakhitov I.R., Yusupov R.V., Tatarsky D.A., Tagirov L.R. // *Sci. China Mater.* – 2021. – V. 64. – P. 1246–1255.

ВЛИЯНИЕ ДОТРАВЛИВАНИЯ НА ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

Рустамов Ф. А., Багиев В. А., Дарвишов Н. Х., Мамедов М. З., Боброва Е.Ю., Аскерова Х.О., Гасанова Р. С.

Бакинский Государственный Университет, НИИ Физических Проблем, Отдел Физики Конденсированного Состояния, Баку, Азербайджан,
farhad.rustamov@bsu.edu.az

Пористый кремний (ПК), полученный электрохимическим или химическим травлением, проявляет видимую фотолюминесценцию (ФЛ) с максимумом выше, чем 1.1 эВ (ширина запрещенной зоны кремния). В настоящее время установлено, что это связано с квантово-размерным эффектом уширения запрещенной зоны в нанокристаллитах кремния с учетом излучательных рекомбинационных уровней, расположенных в запрещенной зоне и связанных с кислородными связями на поверхности [1]. Поэтому наличие или отсутствие этих уровней кардинально изменяет ФЛ свойства ПК. Чтобы исследовать это влияние, в данной работе изучалось влияние дотравливания на спектры ФЛ пористого кремния.

Образцы пористого кремния были получены чисто химическим травлением на монокристаллических подложках кремния р - типа, с удельным сопротивлением 0.1 Ом·см и ориентацией (111). Формирование образцов ПК проводилось в растворе HF : HNO₃ : CH₃COOH в объемном отношении 1200:1:800 [2]. Образцы ПК дотравливались в 10%-ном водном растворе HF и в водном растворе 0.01М КОН.

Сравнение спектров ФЛ выявило как схожий, так и отличительный характер трансформации при дотравливании ПК в растворах HF и КОН. Во всех случаях дотравливание приводит к значительному смещению максимума спектра ФЛ из красной области (1.85 эВ) в желтую область (2.1 eV), а дальнейшая выдержка на воздухе - к обратному смещению. Такая схожесть указывает на идентичный характер влияния такого дотравливания и последующего окисления на механизм ФЛ. Дотравливание полученных образцов в этих травителях приводит к удалению связей Si-O, а значит и удалению локальных рекомбинационных излучательных уровней, расположенных в запрещенной зоне нанокристаллитов кремния. В отсутствие этих локальных уровней в запрещенной зоне, рекомбинация происходит через переходы зона - зона, что и проявляется в смещении максимума ФЛ в высокоэнергетическую область. При выдержке на воздухе происходит обратное окисление поверхности нанокристаллитов кремния. Это приводит заново к появлению излучательных рекомбинационных уровней в запрещенной зоне нанокристаллитов кремния. Излучательная рекомбинация заново идет через эти центры независимо от предыстории обработки образцов, что и приводит к обратному смещению максимума ФЛ в низкоэнергетическую область.

Сравнение спектров ФЛ выявило так же их различие в поведении интенсивности. При дотравливании в растворе HF интенсивность ФЛ остается почти неизменной, при дотравливании в растворах КОН интенсивность заметно уменьшается. Здесь проявляется различная скорость травления кремния и его окисла в этих травителях.

1. C. Delerue, G. Allan, M. Lannoo, Phys. Rev. B 48, 15 (1993) 11024-11036

2. F.A. Rustamov, N.H. Darvishov, M.Z. Mamedov, E.Y. Bobrova, H.O. Qafarova. AJP Fizika, 2022, 28, 3, p.15

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ $ZnIn_2Se_4$: *Ab initio* РАСЧЁТЫ И ЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКИЕ ИЗМЕРЕНИЯ.

Мамедова И.А.¹, Джахангирли З.А.^{1,2}, Ализаде Э.Г.¹, Мамедов Т.Г.¹,
Абдуллаев Н.А.^{1,2}

¹Институт физики Мин. науки и обр. Азербайджана, Баку, Азербайджан

²Бакинский Государственный Университет, Баку, Азербайджан

E-mail: irada_mamedova@yahoo.com

$ZnIn_2Se_4$ принадлежит к семейству дефектных халькопиритов $A^2B^3C^6_4$, привлекает внимание многих исследователей из-за его потенциального применения в полупроводниковых приборах, таких как солнечные элементы [1], устройства памяти [2] и т. д.

Нами получены и охарактеризованы методами рентгеновской дифракции и рамановской спектроскопии кристаллы дефектных халькопиритов $ZnIn_2Se_4$. *Ab initio* расчеты электронных, в том числе оптических, свойств проводились на основе DFT с использованием метода полнопотенциальных линейаризованных дополненных плоских волн (FP-LAPW), реализованного в коде Wien2k. Для экспериментального изучения оптических характеристик полупроводниковых соединений $ZnIn_2Se_4$ была использована спектральная эллипсометрия. Рассчитанные и экспериментальные действительные и мнимые части диэлектрической функции $ZnIn_2Se_4$ показаны на рис. 1. Основные пики рассчитанной действительной и мнимой части расположены около 2.8eV и 5.0eV, соответственно.

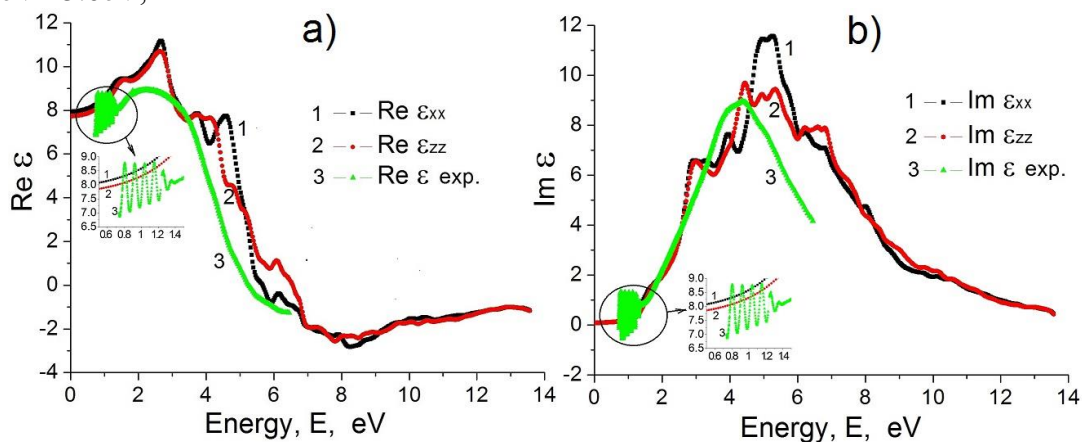


Рис. 1 Рассчитанные и экспериментальные действительные и мнимые части диэлектрической функции $ZnIn_2Se_4$

Измерены и рассчитаны коэффициент поглощения α , показатели преломления n и экстинкции k , значения которых сравнены с литературными данными.

Представлены результаты исследования фотолюминесценции в широком интервале температур от 10К до 300К $ZnIn_2Se_4$. В спектре ФЛ впервые обнаружена полоса с максимумом при 725 нм (1,71 эВ) с коротковолновым плечом при 685 нм (1,81эВ) и менее интенсивная инфракрасная широкая полоса с максимумом при 896 нм (1,39 эВ).

Литература

1. Garcia F. J. and Tomar M. S. // Thin Solid Films. – 1980. - V. 69. – P. 137-139.
2. Filipowicz J., Romeo N. and Tarricone L. // Solid State Communications. – 1980. - V. 38. – P. 619-623.

К ТЕОРИИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИОННОЙ ИНТЕРФЕРОМЕТРИИ. ОСОБЕННОСТИ ЯВЛЕНИЯ И ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ.

В. Г. Кон¹, И. А. Смирнова²

¹ НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия, kohnvict@yandex.ru

² Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Россия, irina@issp.ac.ru

Интерферометры в оптике видимого света являются одними из наиболее точных инструментов для измерения физических констант. Наибольшую известность получил интерферометр с двумя щелями, известный как интерферометр Юнга. Специфика рентгеновского излучения заключается в том, что для него существует возможность принципиально новой интерферометрии на основе дифракции рентгеновского излучения на кристаллической решетке в кристаллах. При этом пучки от двух щелей могут интерферировать в самом кристалле с толщиной меньше миллиметра, создавая периодические полосы с большой и малой интенсивностью. Рентгеновский дифракционный интерферометр был исследован теоретически в [1] для схемы с двумя щелями, аналог интерферометра Юнга. В [2] был предложен другой тип интерферометра, состоящий из двух блоков кристалла.

В данной работе [3] обсуждается другой способ улучшения интерферометра. Идея состоит в том, чтобы совместить двухлинзовый интерферометр на основе планарных составных преломляющих линз с дифракцией в кристалле, рис.1. Интерферометр позволяет измерять фазовый сдвиг при прохождении узкого пучка излучения через слой любого материала. Объект можно поставить перед кристаллом в один из фокусов интерферометра. На рис. 2 интенсивность в отраженном пучке сразу после выхода из кристалла. Для кривой 3 в левом пучке перед кристаллом объект в виде волокна из бора диаметром 13.78 мкм, для кривой 2 - 6.89 мкм.

В работе исследуется вопрос о возможности прецизионного измерения коэффициента преломления разных веществ с помощью интерферометра нового типа, а также новый тип имиджинга микрообъектов и газовых капсул в кристаллах. Обсуждается использование интерферометра для исследования пленочных покрытий кристалла-интерферометра. Определение неоднородности состава или толщины и структурного состояния пленок. Дополнительно существует возможность изучать параметры самого кристалла-интерферометра.

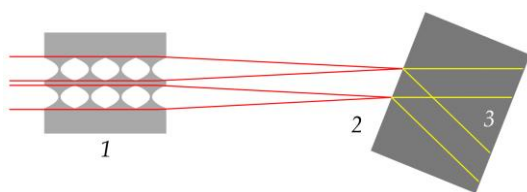


Рис.1. Главная часть возможной схемы эксперимента: 1 – интерферометр на основе планарных линз, 2 – монокристалл, 3 – область перекрытия пучков в монокристалле.

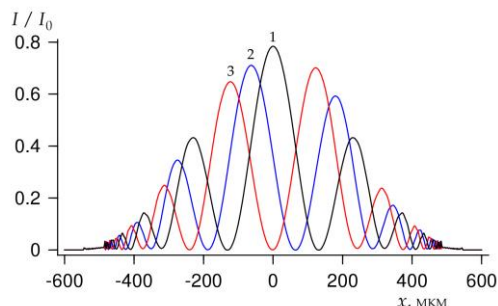


Рис. 2. Распределение интенсивности в области перекрытия пучков для кристалла кремния толщиной 0.8 мм, 440 отражения, энергии фотонов 10 кэВ, линза с апертурой 50 мкм, радиусом кривизны 6.25 мкм и расстоянием между центрами 60 мкм.

Сдвиг фазы волновой функции в левом фокусе равен 0 для кривой номер 1 (черная), $-\pi/2$ для кривой 2 (синяя), $-\pi$ для кривой 3 (красная).

1. Balyan M. K. // Acta Cryst. A. 2010. - V. 66. – P. 660-668.
2. Кон В. Г., Смирнова И. А. // Кристаллография. 2022. - Т. 67. – № 2. - С. 185-193.
3. Kohn V. G., Smirnova I. A. // Crystallography Reports. 2022. - V. 67. - №7. – P. 1068–1074.

МАГНИТОТРАНСПОРТ В НОВЫХ МАГНИТНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРАХ $MnSb_2Te_4$.

Зверев В.Н.¹, Абдуллаев Н.А.^{2,3}, Алигулиева Х.В.⁴, Алиев З.С.³,
Амирасланов И.Р.^{2,3}, Мамедов Н.Т.^{2,3}, Чулков Е.В.^{5,6}

¹Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка, Россия

²Институт физики Мин. науки и обр. Азербайджана, Баку, Азербайджан

³Бакинский Государственный Университет, Баку, Азербайджан

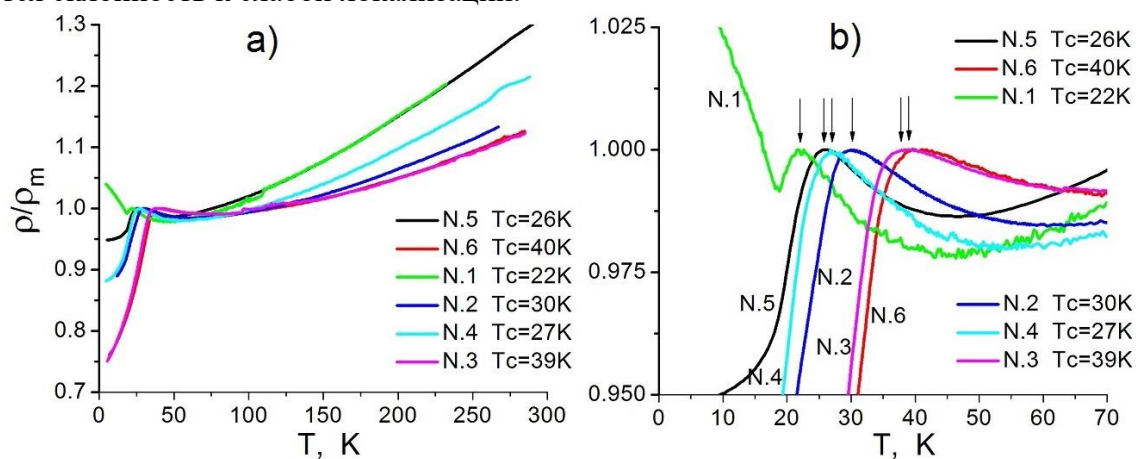
⁴Сумгаитский Государственный Университет, Сумгаит, Азербайджан

⁵Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

⁶Donostia International Physics Center (DIPC), Donostia-San Sebastian, Spain

E-mail: abnadir@mail.ru

Получены и охарактеризованы методами рентгеновской дифракции и рамановского рассеяния монокристаллы новых магнитных топологических изоляторов $MnSb_2Te_4$. В настоящей работе представлены данные электрических и гальваномагнитных (эффект Холла и магнитосопротивление) свойств $MnSb_2Te_4$. В отличие от изоструктурного антиферромагнитного соединения $MnBi_2Te_4$ соединение $MnSb_2Te_4$ является ферромагнетиком, о чём свидетельствуют данные измерений магнитопольной зависимости намагниченности и температурной зависимости магнитной восприимчивости [1,2]. Такое различие обусловлено присутствием значительного количества антисайтных дефектов вследствие перемены мест атомами Mn и Sb [1,2]. Влияние дефектов сказывается не только на магнитных свойствах, но и на электрических измерениях (Рис. 1). На Рис. 1а показаны температурные зависимости приведенного сопротивления в широкой области температур 1.4-300К. Зависимости $\rho/\rho_m(T)$ имеют «металлический» вид с особенностями при температурах 20-40 К, обусловленных магнитным фазовым переходом парамагнетик-ферромагнетик. Как видно из Рис. 1б, в представленных шести образцах наблюдаются различные температуры Кюри: $T_c=22K$; 26K; 27K; 30K; 39K и 40K. В наиболее дефектном образце самая низкая температура Кюри, а при низких температурах наблюдается слабая локализация вследствие разупорядочения структуры. В образце с низким $T_c=26K$ также наблюдается склонность к слабой локализации.



Литература

1. Wimmer S., Sánchez - Barriga J., Küppers P., Otrokov M.M., Chulkov E.V., Rader O., et al. // *Advanced Materials*. – 2021. – V. 33. - № 42.- P. 2102935 (11p.).
2. Murakami T., Nambu Y., Koretsune T., Xiangyu G., Yamamoto T., Brown G.M., and Kageyama H. // *Phys. Rev. B*. – 2019.- V. 100. - № 19. – P. 195103 (6p.).

ВЛИЯНИЕ РАЗЛИЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ КОНТРТЕЛ НА ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТКАНЕВЫХ УГЛЕРОДНЫХ КОМПОЗИТОВ

Щербакова О.О.¹, Муравьева Т.И.¹, Буковский П.О.¹, Шпенев А.Г.¹

¹Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия

E-mail: shcherbakovaoo@mail.ru

Композиты, армированные углеродными волокнами, представляют собой новые материалы, которые разрабатывались в течение последних нескольких десятилетий. Благодаря своим превосходным эксплуатационным свойствам они являются конструкционными и функциональными материалами, которые применяются во многих областях промышленности [1].

Для оценки влияния материала контробразца на трибологические свойства исследуемых композитов, на трибометре УМТ-2 были проведены испытания по схеме «кольцо – диск». В качестве контртел (кольцо) были выбраны керамика (карбид кремния) и сталь (ШХ-15). Диски изготавливали из углеродных композитов. Были исследованы 4 экспериментальных образца тканевых композитов, на основе различных препрегов (образцы 1 и 3 на основе ПАН, модифицированные карбонизованными и графитированными волокнами соответственно, образцы 2 и 4 на основе вискозы, также модифицированные карбонизованными и графитированными волокнами). На рисунке 1, в качестве примера приведены СЭМ-изображения поверхности образца 2 после испытания со стальным (Рис.1, а) и керамическим (Рис. 1, б) контртелами.

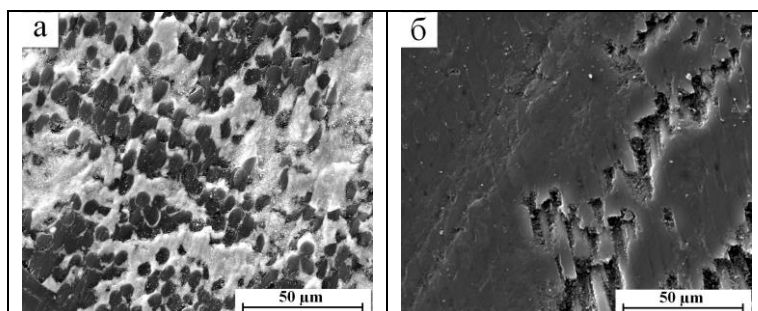


Рисунок 1. СЭМ-изображения поверхности образца 2: а – после испытания со стальным контртелом; б – с керамическим контртелом.

После испытаний на поверхности образцов образуется углеродосодержащая пленка ВС, которая сглаживает поверхность. Однако после испытаний со стальным контртелом, наряду с этим процессом, на поверхности изучаемых образцов наблюдается также массоперенос железа, происходит износ контртела. После испытаний с керамическим контртелом массоперенос элементов отсутствует. Данный факт свидетельствует о том, что, керамическое контртело в процессе трения практически не изнашивается. Установлено, что углеродные композиты в контактной паре с керамическим контртелом имеет лучшие трибологические характеристики, у них коэффициент трения составляет $\sim 0,07$ и интенсивность изнашивания ~ 2 мкм/км (со стальным контртелом эти значения составляют $\sim 0,2$ и $\sim 4,5$ мкм/км соответственно). Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ в рамках научного проекта № 19-19-00548-П.

Литература

1. Гуняев Г.М., Гофин М.Я. // Авиационные материалы и технологии. – 2013. С. – 62-90.

МАГНИТОТРАНСПОРТ В ТВЁРДЫХ РАСТВОРАХ $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$, ЛЕГИРОВАННЫХ Mn

Абдуллаев Н. А.^{1,2}, Наджафов А. И.¹, Мамедов Т.Г.¹, Алигулиева Х.В.³,
Кахраманов С.Ш.¹, Алиева В.Б.¹, Зверев В.Н.⁴

²Институт физики Мин. науки и обр. Азербайджана, Баку, Азербайджан

³Бакинский Государственный Университет, Баку, Азербайджан

⁴Сумгаитский Государственный Университет, Сумгаит, Азербайджан

¹Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка, Россия

E-mail: abnadir@mail.ru

Твёрдые растворы $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$ являются известными эффективными термоэлектрическими материалами [1] и топологическими изоляторами [2]. Поэтому легирование этих материалов магнитными примесями представляет особый интерес. В настоящей работе представлены данные исследований влияния магнитных примесей 1,0 и 3,0 ат.% Mn на электрические и гальваноманнитные свойства соединения $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$. В монокристаллах твёрдых растворов $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$, легированных 1 ат.% Mn при температурах ниже 180К наблюдается активационная проводимость с энергией активации 10 meV (рисунок 1а, кривые 1 и 2). После термического отжига, кроме активационной проводимости, при температурах ниже 20 К наблюдается “металлический” характер проводимости (рисунок 1а, кривая 2), обусловленный проводимостью по примесной зоне. Выявлено, что в монокристаллах твёрдых растворов $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$, легированных 3 ат.% Mn наблюдается “металлический” характер проводимости с особенностью при низких температурах около 25К (рисунок 1б, кривая 1), реагирующей на приложенные внешние магнитные поля. После термического отжига “металлический” характер проводимости сохраняется, но указанная особенность практически исчезает (рисунок 1б, кривая 2). Оценены подвижность и концентрация носителей заряда.

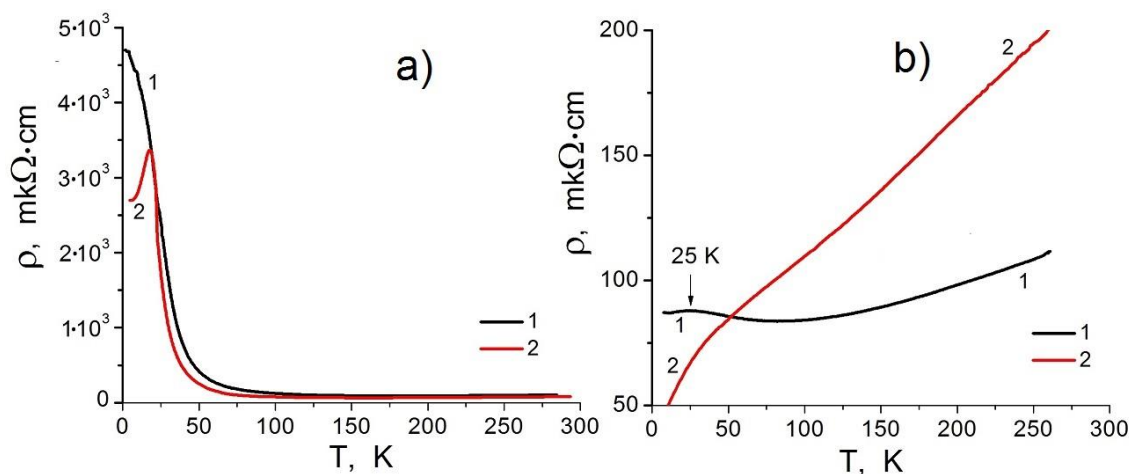


Рисунок 1. Температурные зависимости удельного сопротивления твёрдых растворов $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$, легированных 1 ат.% Mn (а) и 3 ат.% Mn (б)). Кривые 1 – неоттожжённые образцы, кривые 2 – образцы после отжига при температуре 220К в течении 600 часов.

Литература

1. Ibrahim A.M. and Thomson D.A. // Materials Chem. and Physics.- 1985. – V.12 -№ 1.- P. 29-36.
2. Teo J.C.Y., Fu L., and Kane C.L. // Physical Review B. – 2008. V.78 - № 4. - P. 045426.

СЛАБОДИССИПАТИВНОЕ СОСТОЯНИЕ ПОВЕРХНОСТИ Bi_2Se_3 И Bi_2Te_3 .

Кахраманов С.Ш., Абдуллаев Ю.А., Бадалов А.А.,
Оруджева Х.В., Абдуллаев Н.А.

Институт физики им. Г.М. Абдуллаева МНО Азербайджана, Баку
e-mail: samir.gahramanov@gmail.com

Исследования поверхностных свойств топологических изоляторов (ТИ) Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 нужны для выявления всего диапазона возможных состояний на границе раздела гетерофаз и в приповерхностной области с целью практического использования этих материалов в приложениях электроники и спинтроники.

При нанесении примесей для модификации поверхности этих кристаллов согласно [1,2] осаждение атомов на поверхность кристалла приводит к интеркаляции осажденных атомов и к расширению межслоевых ван-дер-ваальсовых (vdW) расстояний в слоистых топологических изоляторах, что ведет к одновременному появлению параболического и М-образного состояния двумерного электронного газа (2DEG). В работе [3] показано, что модификация поверхности Bi_2Se_3 адсорбцией калия вызывала колебания плотности заряда, распространяющиеся в объем кристалла, а также приводила к появлению дальнедействующего потенциала и изгибу приповерхностных зон, и новых состояний в зонной структуре, напоминающих состояния двумерного электронного газа.

Были проведены исследования морфологии поверхности (0001), изучалось влияние электролитического осаждения ионов калия на поверхностные свойства кристаллов Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 модуляционной спектроскопией электроотражения (ЭО). Исследовались кристаллы, полученные методом Бриджмена: образцы Bi_2Te_3 p -типа с концентрацией носителей заряда $n = 1,9 \times 10^{19} \text{см}^{-3}$ и коэффициентом термо-э.д.с. $\alpha = +221 \text{мкВ/град}$, и n -типа Bi_2Se_3 с $n = 1,1 \times 10^{19} \text{см}^{-3}$ и $\alpha = -52 \text{мкВ/град}$. Изображения поверхности получали на сканирующем зондовом микроскопе марки Solver Next фирмы NT-MDT при комнатной температуре. Процесс длительного осаждения атомов калия на поверхность (0001) кристаллов Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3 , после адсорбции приводил к интеркаляции их в vdW пространства ближайших к поверхности квинтетов. Металлизация поверхности калием и уширение ван-дер-ваальсовых промежутков приповерхностной области при интеркаляции, из-за увеличения высоты барьера ведет к ослаблению межслоевого взаимодействия, к уменьшению перекрытия волновых функций разных слоев и ослаблению дисперсии. Модификация поверхности при этом сопровождается увеличением количества носителей заряда и их подвижности с одновременным уменьшением процессов рассеяния, что предполагает переход приповерхностной области в состояние с меньшей диссипацией.

1. Eremeev S.V., Vergniory M.G., Menshchikova T.V., Shaposhnikov A.A., Chulkov E.V. // New Journal of Physics. 2012, 14, 113030.
2. Menshchikova T.V., Eremeev S.V., E.V. Chulkov // JETP Letters. 2011, V.94, 2, pp 106-111
3. Förster T., Krüger P., Rohlfing M. // Phys. Rev. B, 2015, 91, 035313.

ИЗМЕНЕНИЯ СКОРОСТИ ЗАРОЖДЕНИЯ В ПРОЦЕССЕ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ НАНОКРИСТАЛЛИЗАЦИИ МЕТАЛЛИЧЕСКОГО СТЕКЛА $\text{Al}_{86}\text{Ni}_9\text{Gd}_5$

Васильев С.В.^{1,2}, Свиридова Е.А.^{1,2}, Аронин А.С.³, Ткач В.И.¹

¹ГБУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», Донецк, Россия

²ГО ВПО «Донбасская национальная академия строительства и архитектуры»,
Макеевка, Россия

³Институт физики твердого тела РАН, Черногоровка, Россия

E-mail: ksvir@list.ru

Цель настоящей работы определить изменения скорости зарождения нанокристаллов Al в металлическом стекле $\text{Al}_{86}\text{Ni}_9\text{Gd}_5$ в процессе нанокристаллизации при непрерывном нагреве и проанализировать полученные результаты в рамках классической теории зарождения. Фундаментальные исследования закономерностей процесса нанокристаллизации аморфных сплавов на основе Al и Fe имеют большое прикладное значение поскольку создают базис для разработки нанокompозитов с высокими уровнями физических свойств. Основные результаты исследований могут быть суммированы следующим образом.

Установлено, что нанокристаллизация стекла $\text{Al}_{86}\text{Ni}_9\text{Gd}_5$ при нагреве со скоростью 10 К/мин протекает в диапазоне 451–550 К и приводит к образованию нанокompозитной структуры, состоящей из нанокристаллов Al со средним размером (L) 21 ± 1 нм и объёмной долей $X = 0,3$, диспергированных в остаточной аморфной матрице. С повышением температуры нагрева оба параметра меняются по кривым с насыщением, однако рост размеров прекращается на начальных стадиях процесса (после нагрева до 470–480 К) в то время, как рост доли превращённого объёма продолжается до конца нанокристаллизации, что позволило применить к описанию кинетики процесса модель мгновенного роста.

Экспериментально измеренная зависимость $L(T)$ была использована для оценки температурной зависимости коэффициента эффективной диффузии, контролирующей переход атомов через границу раздела аморфной и кристаллической фаз, а в комбинации с кинетической кривой $X(T)$ – для оценки изменений скорости зарождения нанокристаллов Al, $J_{\text{exp}}(T)$, в процессе нанокристаллизации. Установлено, что скорость зарождения в диапазоне температур 450–540 К изменяется следующим образом: возрастает от $4,5 \times 10^{19} \text{ м}^{-3}\text{с}^{-1}$, достигает максимального значения $2,9 \times 10^{20} \text{ м}^{-3}\text{с}^{-1}$ при 470 К, а затем снижается до примерно $10^{18} \text{ м}^{-3}\text{с}^{-1}$ при 540 К.

Анализ полученной зависимости, проведенный в рамках трёх приближённых моделей на основе классического гомогенного механизма зарождения показал, что изменения $J_{\text{exp}}(T)$ наиболее корректно описываются моделью, учитывающей уменьшение скорости зарождения за счёт снижения термодинамической движущей силы образования зародышей Al, обусловленного обогащением остаточной аморфной матрицы легирующими элементами. Оценённые в рамках этой модели значения удельной свободной энергии границы раздела зародыш/матрица и их температурная зависимости согласуются с литературными данными. Обсуждены возможные причины различия модельных и экспериментальных значений $J_{\text{exp}}(T)$ в области температур ниже максимума.

СТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЛОИСТЫХ КОМПОЗИТОВ, КОНСОЛИДИРОВАННЫХ МЕТОДОМ КРУЧЕНИЯ ПОД ДАВЛЕНИЕМ АМОРФНЫХ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЛЕНТ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ

Варюхин В.Н.¹, Васильев С.В.^{1,2}, Ткаченко В.М.¹, Свиридова Е.А.^{1,2},
Бурховецкий В.В.¹, Лимановский А.И.¹, Ткач В.И.¹

¹ГБУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», Донецк, Россия

²ГО ВПО «Донбасская национальная академия строительства и архитектуры»,
Макеевка, Россия

E-mail: ksvir@list.ru

В работе приведены результаты исследований методами рентгенографии, сканирующей электронной микроскопии, измерений микротвёрдости и испытаний на трёхточечный изгиб слоистых образцов алюминиевых сплавов, полученных консолидацией методом кручения под высоким давлением (КВД). В качестве исходных материалов служили быстроохлаждённые ленты сплавов $Al_{86}Ni_9Gd_5$, и $Al_{95.1}Cr_{2.5}Mo_{1.4}Ti_{0.4}Zr_{0.3}V_{0.3}$ с аморфной и кристаллической структурами соответственно, а также алюминиевая фольга. Образцы с двух- и многослойной структурами получали путём деформирования от 1 до 6 оборотов между плоскими наковальнями под давлением 2 и 4 ГПа.

Установлено, что твердость дисков, консолидированных из фольг Al и кристаллических чешуек, возрастает в приблизительно в 4 и 1,5 раз соответственно, что обусловлено преимущественно уменьшением размеров зерен и ростом микронапряжений. Консолидация ленточных образцов с аморфной структурой приводит к формированию нанокompозитной структуры, состоящей из нанокристаллов Al с размерами 9–10 нм и объёмной долей 0,23, диспергированных в остаточной аморфной матрице, что приводит к увеличению твёрдости от 2,7 до 4,1–4,6 ГПа. Существенно более высокие значения микротвёрдости (до 6,2 и 6,45 ГПа) наблюдались в отдельных участках слоистых образцов, состоящих из аморфной ленты, помещённой между пакетами алюминиевых фольг и кристаллической ленты, помещённой между двумя аморфными лентами соответственно.

Сравнительный анализ показал, что пластичность дисков с нанокompозитной структурой сплава $Al_{86}Ni_9Gd_5$, полученных консолидацией (1,9–2,3%), существенно выше пластичности нанофазных композитов с аналогичными структурными параметрами, сформированных термической обработкой (0,4%). Плакирование аморфных лент алюминиевыми фольгами приводит к повышению уровня пластичности консолидированных образцов до 3,6%, а наиболее высокой пластичностью (6,4%) обладали трёхслойные диски, состоящие из кристаллической ленты, помещённой между аморфными лентами.

Обсуждены связи между структурными характеристиками консолидированных слоистых образцов и изменениями их механических свойств. На основании полученных результатов сделан вывод о перспективности использования методов интенсивной пластической деформации для получения объёмных материалов на основе Al с улучшенными механическими свойствами.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ СВЧ И ТЕРМИЧЕСКОЙ ПИРОЛИЗНОЙ КАРБОНИЗАЦИИ ОБРАЗЦОВ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ

Дьячкова И. Г.¹, Золотов Д. А.¹, Кумсков А. Л.¹, Волчков И. С.¹, Берестов В. В.²,
Матвеев Е. В.², Васильев А. Л.¹, Асадчиков В. Е.¹

¹ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия, sig74@mail.ru

²НИИ Перспективных материалов и технологий, Москва, Россия, maegor@gmail.com

Расширение сфер применения активированных углеродных материалов (АУМ) в различных отраслях промышленного производства определяет повышенный спрос на них [1,2]. В связи с этим актуальны исследования, направленные на поиск альтернативных решений для производства АУМ, отвечающих современным требованиям производительности, экологичности и экономичности производства.

В работе представлены новые данные об условиях протекания процессов пиролизной карбонизации высокомолекулярного органического соединения (целлюлозы) под действием сверхвысокочастотного электромагнитного поля, а также данные сравнительного анализа свойств АУМ, полученных микроволновым и классическим термическим способами. Исследования свойств образцов целлюлозы карбонизированной СВЧ и термическим способом проведены с использованием методов рентгеновской томографии [3] и рентгенофлуорисцентного анализа, растровой и просвечивающей электронной микроскопии, рентгенофазового анализа [4] и анализа адсорбционной активности [5].

Установлено, что в процессе СВЧ карбонизации примеси неравномерно осаждаются на волокнах поверхностных слоев, практически не загрязняя фибриллы. В то время как, при термической карбонизации происходит диффузия части примеси, находящейся на поверхности и в межволоконном пространстве, непосредственно в волокно, в результате чего формируются нановключения непосредственно в фибриллах образца. При СВЧ нагреве происходит более активное развитие пористой структуры волокна. В термически карбонизированном образце аморфной фазы больше. Идентифицированы наиболее вероятные кристаллические фазы, образовавшиеся в образцах в процессе карбонизации: графит с кристаллическими решетками, характеризующимися гексагональной и тетрагональной сингониями. Адсорбционная активность СВЧ карбонизированного образца почти в 3 раза выше, чем у термически карбонизированного, при значительно меньшем времени нагрева (10 минут против 120 минут) и большем выходе готового материала (25% против 20%). Проведенные сравнительные исследования двух методов карбонизации углеродных материалов, дают основания считать СВЧ метод весьма перспективным и требующим дальнейшего изучения.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части электронных и рентгеновских исследований, в рамках задания Минобрнауки России FNER-2022-0002 в части получения карбонизированных углеродных образцов и исследования адсорбционной активности.

Литература

1. Kosheleva R.I. et al. // Environ. Chem. Lett. – 2019. – V. 7. P. 429–438.
2. Gopinath A., Kadirvelu K. // Environ. Chem. Lett. – 2018. – V. 16. P. 1137–1168.
3. Бузмаков А.В. и др. // Кристаллография. – 2018. – Т.63. – № 6. С. 1007-1011.
4. Bruno I. et al. // Data science journal. – 2017. – V. 16.
5. ГОСТ 4453-74. Уголь активный осветляющий древесный порошкообразный. Технические условия. Дата введения 1 января 1976 г.

ОСОБЕННОСТИ ЛОКАЛИЗАЦИИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ В БРОНЗОВЫХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ОБРАЗЦАХ

Копытский В.О., Петров Е.В.

Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мерджанова РАН, Черногловка, Россия, kvo@ism.ac.ru

В работе исследовано образование откольной повреждаемости в бронзовых толстостенных цилиндрических образцах из двух марок БрАЖ9-4 и БрАМц9-2, при проведении экспериментов по метанию пластины-ударника, разогнанной энергией взрыва. В работе [1] приведена схема эксперимента и получены значения скорости метаемой пластины. При скорости метания пластины 1,5 км/с оказываемое на образец давление равно 15 ГПа, что значительно превышает откольную прочность бронзы равную 5 ГПа, тем самым образуя разрушение в материале.

Процесс образования разрушения в результате распространения ударных волн в твердом теле подробно описан в работах [2,3]. Особенностью локализации пластической деформации в толстостенных цилиндрических образцах, является наличие дополнительных свободных поверхностей, благодаря отверстию, которое способствует дополнительной разгрузке сходящихся ударных волн. Развитие разрушения происходит по пластической модели деформации. У поверхности соударения наблюдается послойный отрыв материала на глубину до 10 мм. От поверхности соударения на глубине 15 мм был сделан поперечный шлиф образца (рис. 1). На поверхности изготовленного шлифа можно наблюдать выходящие трещины, которые находятся посередине между краем и отверстием, являясь продолжением отрыва слоя на поверхности соударения. Микротрещины распространяются вдоль оси цилиндра, исходная микроструктура образцов способствует такому развитию разрушения, так как прутки для исследуемых образцов изначально были изготовлены методом прокатки.

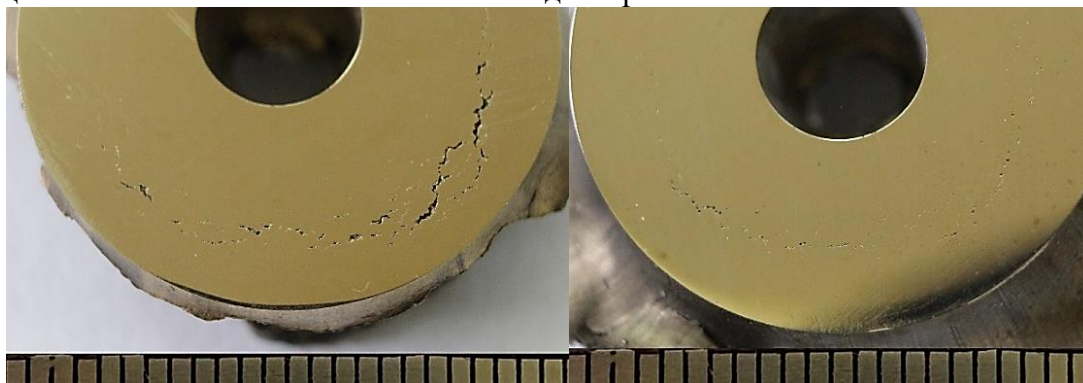


Рис. 1. Внешний вид поверхности шлифов сохраненных образцов бронзы марок БрАЖ9-4 (слева) и БрАМц9-2 (справа)

Исследование полученных образцов позволило изучить весь процесс развития разрушения в бронзовых толстостенных цилиндрах, вызванный высокоскоростным соударением с пластиной. В результате интерференции ударных волн в материале происходит образование микропор и микронесплошностей, их объединение и рост, постепенное превращение в трещины, образуя зоны откольного разрушения, и их выход на свободные поверхности образца, создавая откол слоев материала.

1. Копытский В.О. // Сборник трудов конференции ЛаПлаз-2022. Москва. 2022. С. 226.
2. Канель Г.И. // Ударные волны в физике твердого тела. М.: Физматлит, 2018. 208 с.
3. Buravova S.N., Petrov E.V. // Forces in Mechanics. 2021. V. 3, P. 100015.

КОМПОЗИТ ГРАФЕН/Ni КАК НАНОПОКРЫТИЕ ДЛЯ УЛУЧШЕНИЯ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОВЕРХНОСТИ Ni

Сафина Л.Р., Баимова Ю.А.

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, Россия

Металлы, такие как Ni, Al, Cu, Fe, широко используются в строительстве, авиастроении, машиностроении, приборостроении и т.п. В промышленности механические свойства металлических материалов являются основной сдаточной характеристикой, на которой строится вся система их качества. Поэтому изучение возможностей управления механическими свойствами является интересной задачей на сегодняшний день. Одним из способов повышения механических свойств поверхности металлов является покрытие металла композитной нанопленкой. Композиты на основе графеновой сетки и наночастиц металлов (например, Ni и Cu), благодаря высоким показателям механических характеристик, являются перспективными материалами для защиты поверхностей различных металлов [1]. В данной работе методом молекулярно-динамического моделирования исследуются механические свойства поверхности Ni, покрытой композитом графен/Ni, где варьируется толщина нанопокрyтия.

Начальная структура представляет собой ГЦК образец Ni(111) с размерами $15.5 \times 15.2 \times 5.1$ нм. Данная структура покрывается композитной нанопленкой разной толщины: 1.0, 2.3 и 5.1 нм. Механические свойства композита оцениваются в процессе одноосного растяжения при комнатной температуре.

Численные эксперименты проводятся в свободно распространяемом пакете молекулярно-динамического моделирования LAMMPS. Во всех случаях используются периодические граничные условия. Для описания межатомных взаимодействий применяются два потенциала – потенциал AIREBO для взаимодействия углерод-углерод и потенциал Морзе для описания межатомного взаимодействия никель-графен и никель-никель. Параметры для потенциала были выбраны из предложенных в работах [1,2].

В процессе молекулярно-динамического моделирования выявлено, что с увеличением толщины композитного покрытия повышаются механические свойства соединения Ni/композит графен/Ni. Для структуры с толщиной нанопокрyтия 5.1 нм предел прочности составляет 22 ГПа, в то время как для соединения с толщиной покрытия 1 нм предел прочности практически в 4 раза ниже. Полученные результаты показывают, что композит графен/Ni является перспективным материалом для использования в качестве нанопокрyтий и улучшения механических характеристик поверхности Ni.

Работа Сафиной Л.Р. выполнена за счет гранта Республики Башкортостан для молодых ученых. Работа Баимовой Ю.А. выполнена за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-72-10112).

Литература

1. Safina L.R., Baimova J.A., Krylova K.A., Murzaev R.T., Mulyukov R.R. // Lett. Mater. – 2020. – V. 10. – № 3. – P. 351-360.
2. Safina L.R., Krylova K.A., Baimova J.A. // Mater. Today Phys. – 2022. – V. 28. – P. 100851.

COMPARISON OF VIBRATIONAL ENERGY CALCULATED USING FIRST-PRINCIPLES BASED ON THE PHONON AND THE DEBYE-GRÜNEISEN APPROXIMATIONS: APPLICATION TO LAVES PHASE Fe₂Mo

Vasilyev D.A.

Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science of RAS,
Moscow, Russia, dvasilyev@imet.ac.ru; vasilyev-d@yandex.ru

The thermodynamic properties of compounds are currently modeled from *ab initio* calculations using the quasi-harmonic approximation (QHA). The free energy of a compound can be expressed in terms of QHA as a sum of the total energy $E_{tot}(V)$ obtained from first-principles calculations at $T = 0\text{K}$, the electronic $F_{el}(V, T)$, vibrational $F_{vib}(V, T)$ and magnetic $F_{mag}(V, T)$ free energies. The vibrational energy, in turn, can be obtained either using the Debye–Grüneisen method or using the phonon approach, as was done in [1–3].

The vibrational energies obtained along the thermal expansion path of the Fe₂Mo Laves phase calculated using the Debye model [1] and using phonons [2, 3] are shown in Figure 1. The calculation results show that the difference in the energy obtained by these two methods, neglecting the difference δ in calculated zero oscillations, corresponds to the entropy of the magnetic moments of atoms distributed on different sublattices of Fe₂Mo compound. This can be expressed as:

$$F_{phonon}(V, T) = F_{Debye}(V, T) - T \cdot S_{mag}(V, T) - \delta$$

Therefore, when using the Debye model, it is necessary to take into account the magnetic entropy for a correct description of the thermodynamic properties.

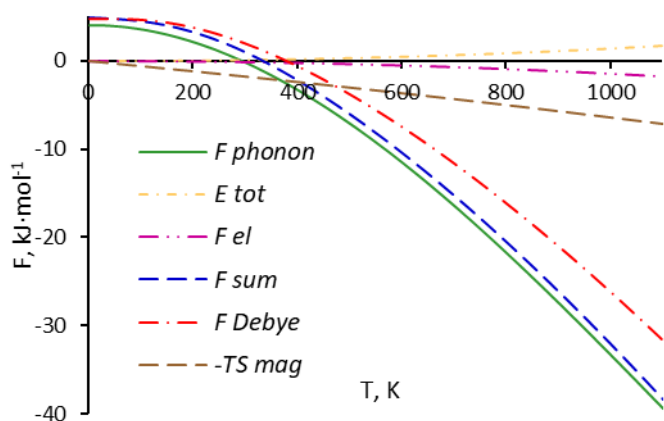


Figure 1. Free energy (F_{phonon}) obtained as a sum of the total, electronic and vibrational energies calculated using *ab initio* based phonon calculations along the thermal expansion path of Fe₂Mo; free energy (F_{sum}) calculated as a sum of the total, electronic, magnetic entropy ($-T \cdot S_{mag}$) and vibration energy (F_{Debye}) reported in [1].

The research was financially supported by the Russian Foundation for Basic Research as a part of scientific project № 19-03-00530.

1. D. Vasilyev, A new method for calculating the thermodynamic and physical properties of compounds: Application to Laves phase Fe₂Mo, *Physica B: Condensed Matter* 621 (2021) 413307.
2. Vasilyev D.A. First-principles phonon calculations of thermodynamic properties of Fe₂Mo Laves phase. //IX Международная конференция «Функциональные наноматериалы и высокочистые вещества» им. чл.-корр. РАН Бурханова Г.С. 3-7 октября 2022, г. Суздаль, Россия с. 127-129.
3. D. Vasilyev, Comparison of thermal expansion path of the Fe₂Mo Laves phase calculated using the DFT-based phonon and Debye-Grüneisen approaches, *Materials Today Communications* 35 (2023) 105550.

ВЫРАЩИВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ ТЕЛЛУРИДА ЦИНКА-КАДМИЯ В УСЛОВИЯХ МИКРОГРАВИТАЦИИ

Ажгалиева А.С.¹, Борисенко Е.Б.¹, Борисенко Д.Н.¹, Бурмистров А.Е.², Колесников Н.Н.¹, Тимонина А.В.¹, Сенченков А.С.², Фурсова Т.Н.¹, Шахлевич О.Ф.¹, Яроцкий Б.И.²

1. Институт физики твердого тела им. Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия, azhgalieva@issp.ac.ru

2. Научно-исследовательский институт стартовых комплексов им. В.П. Бармина (НИИСК), г. Москва, Россия.

Кристаллы тройных соединений на основе CdTe, включающие до 10% цинка, содержащегося в твердом растворе, на сегодняшний день являются одним из ключевых материалов для изготовления детекторов ионизирующего излучения, работающих при комнатной температуре. Кроме того, кристаллы CZT используются в качестве подложек для эпитаксиального наращивания слоев $Cd_{1-x}Hg_xTe$, применяемых в качестве инфракрасных детекторов. В связи с их химической идентичностью и возможностью точного согласования параметров решеток, кристаллы CZT являются более предпочтительными по сравнению с подложками Si, Ge и GaAs. В последние два десятилетия ведутся разработки технологий роста этих кристаллов из расплава. При всех методах роста неизбежны массовые потери, возможно нарушение стехиометрии за счет разности давлений паров компонентов, образование газовых пузырей при кристаллизации и наличие остаточных примесей и частиц теллура. Предпосылки для космических исследований состоят в том, что условия микрогравитации приводят к более однородному составу, удельное электросопротивление увеличивается вдвое, снижается концентрация включений теллура, и в 3-4 раза уменьшается их средний размер.

Для первой серии эксперимента разработаны и изготовлены ампулы с материалами. В ампулу помещают образец, исследуемого материала, состоящий из ориентированной затравки, растворителя и питающего слитка. В качестве затравок использовались ориентированные по {110} кристаллы CZT, питающими нагрузками являлись поликристаллические слитки CZT соответствующих составов. Исходные кристаллы для загрузки составов $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ и $Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te$ были выращены методом вертикальной зонной плавки под давлением аргона. Для выращивания кристаллов CZT в условиях микрогравитации будет использоваться метод движущейся зоны растворителя с избыточным содержанием теллура, что позволяет снизить температуру процесса (от температуры плавления CdTe 1092° С до ~ 800° С) до уровня, приемлемого для оборудования, размещаемого на космических объектах. При таких температурах кристаллизации растворимость избыточного теллура в твердом CdTe снижается, тем самым ограничивая образование выделений теллура в кристалле при его охлаждении.

Для контроля состава материалов, предназначенных для затравки, растворителя и питающего слитка было проведено измерение элементного состава и рентгенофазовый анализ. Также проведена съемка спектров пропускания в видимом диапазоне и вычислена ширина запрещенной зоны образцов кристаллов $Cd_{0,96}Zn_{0,04}Te$ и $Cd_{0,9}Zn_{0,1}Te$ при комнатной температуре. Был проведен рентгеноструктурный анализ, определены плотности дислокаций, малоугловых границ и включений второй фазы кристалла теллурида цинка кадмия предназначенного для затравки.

Ампулы с материалами подготовлены для отправки на МКС для выращивания в условиях микрогравитации на ростовом оборудовании, уже установленном в модуле «Наука».

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ МИКРОСТРУКТУРЫ И ПАРАМЕТРА РЕШЁТКИ АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА АК9, СОСТАРЕННОГО В ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Осинская Ю.В., Магамедова С.Г., Четверкин А.А.

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия, oju76@mail.ru

Известно, что микротвёрдость закалённых алюминиевых сплавов типа Д1, Д16, А1–Li [1, 2], искусственно состаренных в постоянном и импульсном магнитных полях, заметно изменяется по сравнению со случаем старения без магнитного поля.

Целью данной работы является комплексное экспериментальное исследование влияния постоянного магнитного поля (ПМП) напряженностью 7 кЭ, времени отжига 4 ч и температуры старения от 120 до 200 °С на параметр кристаллической решётки и микроструктуру состаренного алюминиевого сплава АК9.

Анализ полученных результатов позволяет сделать следующие краткие выводы:

1. Металлографический анализ показал, что старение без наложения магнитного поля при всех температурах отжига всегда приводит к увеличению до 14 % площади участков, идентифицируемых как кремний с элементами эвтектики по сравнению с закалённым состоянием. Наблюдается характерная для эвтектических сплавов структура поверхности шлифа с игольчатыми кристаллами кремния [3].

2. Установлено, что наложение ПМП на старение алюминиевого сплава АК9 приводит практически всегда к уменьшению площади участков кремния с элементами эвтектики до 7 % по сравнению со случаем старения без наложения поля.

3. Наложение ПМП на процесс старения алюминиевого сплава АК9 не приводит к существенному изменению параметра кристаллической решётки сплава по сравнению со случаем старения без наложения поля. Изменения параметра решётки колеблются в пределах ошибки его измерения, величина которой составляет 0,001 Å.

1. Покоев А.В., Осинская Ю.В., Шахбанова С.Г. и др. // Известия РАН. Серия физическая. 2018, Т. 2. № 7. С. 961-964.

2. Осинская Ю.В., Покоев А.В., Магамедова С.Г. // Известия РАН. Серия физическая. 2021, Т. 85. № 7. С. 1025-1030.

3. Лившиц Б.Г. // Металлография. М.: Металлургия, 1990. 236 с.

**ВЛИЯНИЕ АМПЛИТУДЫ НАПРЯЖЕННОСТИ ИМПУЛЬСНОГО
МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА МИКРОТВЕРДОСТЬ, ПАРАМЕТР РЕШЕТКИ И
ПАРАМЕТРЫ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ СОСТАРЕННОГО
АЛЮМИНИЕВОГО СПЛАВА АК9**

**Осинская Ю.В., Магамедова С.Г., Иванов К.А., Субботина Е.А.,
Комлев А.Д.**

*Самарский национальный исследовательский университет имени
академика С.П. Королева, Самара, Россия, oju76@mail.ru*

Анализ данных [1] показывает, что наложение импульсного магнитного поля (ИМП) практически всегда приводит к увеличению пластических свойств алюминиевого сплава АК9. Наблюдается, так называемый, положительный магнитоэластический эффект (МПЭ) [2–4]. В данной работе представлены результаты экспериментального исследования влияния ИМП амплитудой напряженности от 1 до 7 кЭ и частотой 2 Гц длительностью 4 ч при температуре 175 °С на микротвердость, параметр кристаллической решетки и параметры тонкой структуры состаренного алюминиевого сплава АК9.

Анализ экспериментальных данных позволяет сделать следующие выводы:

1. Установлено, что наложение ИМП приводит к уменьшению микротвердости до 15 %, при этом пластические свойства сплава возрастают. Наблюдается положительный МПЭ. Стоит отметить, что с увеличением амплитуды напряженности ИМП ход графика микротвердости практически не изменяется.

2. Метод рентгенографического анализа показал, что наложение ИМП на старение алюминиевого сплава АК9 практически не приводит к изменению параметра кристаллической решетки сплава по сравнению с отжигом без поля, значения параметров решетки в большинстве своем лежат в пределах ошибки измерения.

3. Обнаружено, что наложение ИМП в большинстве случаев приводит к увеличению средних размеров блоков когерентного рассеяния до 28 % по сравнению со случаем без наложения поля, при этом значения величин относительных микродеформаций и плотности дислокаций уменьшаются. Это свидетельствует о том, что структура сплава при наложении ИМП становится менее искаженной, чем в его отсутствии.

1. Осинская Ю.В., Покоев А.В., Магамедова С.Г. // Известия РАН. Серия физическая. 2021. Т. 85. № 7. С. 1025–1030.

2. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Колдаева М.В., Петржик Е.А. // Кристаллография. 2003. Т. 48. № 5. С. 838–867.

3. Головин Ю.И. // ФТТ. 2004. Т. 46. № 5. С. 769–803.

4. Моргун Р.Б. // УФН. 2004. Т. 174. №2. С. 131–153.

ФАЗООБРАЗОВАНИЕ В БЕРИЛЛИЕВОЙ БРОНЗЕ БрБ-2, СОСТАРЕННОЙ В ПОСТОЯННОМ И ИМПУЛЬСНОМ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

Осинская Ю.В., Емелин И.В., Мигалин Н.В.

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия, oju76@mail.ru

Возможность термомагнитной обработки в постоянном и импульсном магнитных полях (МП), как способа контролируемого воздействия и модификации свойств материалов, остается привлекательным инструментом для решения многих проблем материаловедения [1-5]. В настоящей работе образцы из бериллиевой бронзы БрБ-2, после закалки от 800 °С в воду 20 °С, отжигали с целью старения в вакууме $\sim 10^{-3}$ Па при температуре 350 °С в течение 0,17-2 ч в постоянном МП напряженностью 7 кЭ и импульсном МП амплитудой напряженности 7 кЭ и частотой 2 Гц. Целью работы являлось исследование влияния постоянного и импульсного МП на процесс фазообразования в бериллиевой бронзе БрБ-2.

Анализ полученных результатов позволил сделать следующие основные выводы:

1. Наложение постоянного МП на все режимы термической обработки приводит к увеличению интенсивности дифракционных линий α -твердого раствора на основе Cu до 2 раз относительно линий образцов, состаренных без наложения МП и практически всегда к увеличению их полуширины от 0,03 до 1,34°. Данный факт свидетельствует о более интенсивном процессе формирования совершенной и однородной структуры сплава, а также об увеличении искажений и внутренних напряжений в кристаллической решётке сплава, состаренного в постоянном МП. Кроме этого, на дифрактограммах образцов, состаренных в течении 0,17 и 1 ч в постоянном МП, наблюдаются дифракционные линии, соответствующие фазе γ -CuBe, а на дифрактограмме образца, состаренного в течении 1 ч, обнаружена также линию, соответствующую фазе CuBe₂. Данный факт свидетельствует о более интенсивном процессе фазообразования в сплаве, состаренном в постоянном МП, именно при этих временах старения наблюдаются максимальные значения микротвердости в бериллиевой бронзе БрБ-2 [4].

2. Наложение импульсного МП на процесс старения бериллиевой бронзы БрБ-2 практически не приводит к смещению дифракционных линий α -твёрдого раствора на основе Cu и увеличению их полуширины по сравнению с положением и полушириной дифракционных линий образцов, состаренных без МП. Кроме этого обнаружено, что интенсивность наблюдаемых линий уменьшается до 2,5 раз, что свидетельствует о более медленном процессе фазообразования. Линий, соответствующих другим фазам, в частности фазе γ -CuBe, не обнаружено, что собственно говоря, отражается на низких значениях микротвердости, обнаруженных ранее [5].

1. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Колдаева М.В. Петржик Е.А. // Кристаллография. 2003, Т. 48. № 5. С. 838-867.
2. Головин Ю.И. // Физика твердого тела. 2004, Т. 46. Вып. 5. С. 769-803.
3. Моргунов Р.Б. // Успехи физических наук. 2004, Т. 174. № 2. С. 131-153.
4. Осинская Ю.В., Покоев А.В., Пост Р., Вильде Г., Дивинский С.В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2020, №5. С. 36-44.
5. Осинская Ю.В., Петров С.С., Покоев А.В. // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2009, Т. 11. № 5. С. 56-63.

ВРЕМЕННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПАРАМЕТРОВ МАГНИТОПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В АЛЮМИНИЕВОМ СПЛАВЕ В95пч, СОСТАРЕННОМ В ПОСТОЯННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

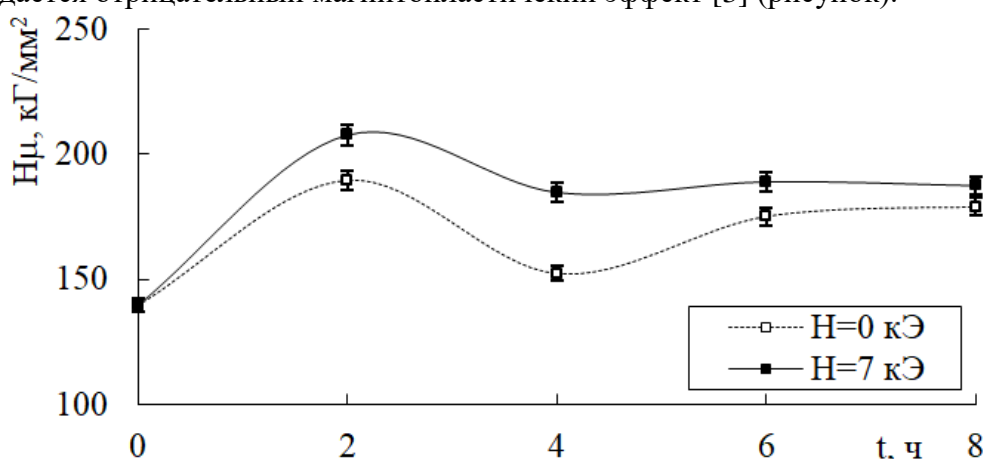
Осинская Ю.В., Макеев С.Р.

*Самарский национальный исследовательский университет имени
академика С.П. Королева, Самара, Россия, oju76@mail.ru*

Известно [1, 2], что в процессе старения металлических сплавов постоянное магнитное поле (ПМП) влияет на структуру, количество и размер фаз, которые затрудняют движение дислокаций, что и приводит к повышению прочностных свойств сплавов. В связи с этим целью данной работы является комплексное экспериментальное исследование влияния ПМП напряженностью 7 кЭ, времени отжига от 2 до 8 ч, температуры старения 140 °С на микроструктуру, микротвердость и параметры тонкой структуры состаренного алюминиевого сплава В95пч.

Анализ полученных результатов позволяет сделать следующие краткие выводы:

1. ПМП не оказывает существенного воздействия на структуру и размер зерен сплава.
2. Обнаружено существенное увеличение микротвердости до 21 %, наблюдается отрицательный магнитоэластический эффект [3] (рисунок).



3. Методом рентгеновского анализа установлено, что временные зависимости параметров тонкой структуры коррелируют с временными зависимостями микротвердости, что согласуется с основными классическими закономерностями процесса старения. Кроме этого, ПМП не изменяет стадийности процесса старения.

4. Установлено, что наложение ПМП приводит к уменьшению среднего размера блоков когерентного рассеяния и увеличению плотности дислокаций и величины относительной микродеформации, что свидетельствует о большей искаженности кристаллической решетки по сравнению со старением без поля.

1. Осинская Ю.В., Покоев А.В., Дивинский С.В., Магамедова С.Г. // Известия РАН. Серия физическая. – 2022. – Т. 86. – № 11, Москва: Наука. – С. 1545–1552.

2. Осинская Ю.В., Покоев А.В., Пост Р., Вильде Г., Дивинский С.В. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2020. – №5, Москва: Наука. – С. 36–44.

3. Покоев А.В., Осинская Ю.В., Гречников Ф.В., Ерисов Я.А. Способ термической обработки деталей из алюминиевого сплава В95пч в постоянном магнитном поле // Патент на изобретение №2764254 от 11.01.21.

УДАРНАЯ МЕЛЬНИЦА

Ажгалиева А.С.¹, Борисенко Д.Н.¹, Колесников Н.Н.¹, Жохов А.А.¹

¹ИФТТ РАН, г. Черноглавка, Россия, bdn@issp.ac.ru

Для измельчения материалов в промышленности используются различные виды мельниц, принцип действия которых обусловлен основными способами разрушения: раздавливание, истирание, раскалывание, удар и резание. [1]. Идея использования сжатой струи газа для измельчения твердого материала получила достаточно много вариантов конструктивного оформления [2].

В лаборатории физико-химических основ кристаллизации ИФТТ РАН была разработана ударная мельница, которая позволяет при небольших технических и экономических затратах получить высокую равномерность измельчения стружки тугоплавких металлов с минимальным содержанием пылевой фракции и нулевым содержанием продуктов износа для повторного использования в электрометаллургии. Технический результат достигается за счет использования стержневых отбойников расположенных каскадом в области первого диска Маха, а отбойная плита расположена в зоне турбулентности, и снабжена винглетами с отверстиями для сепарации измельченного металла. Кинематическая схема ударной мельницы представлена на рис.1 Цифрами обозначены: (1) – корпус; (2) – сопло Лавалья; (3) – стержневые отбойники; (4) – отбойная плита; (5) – винглеты с отверстиями; (6) – подача газа-энергоносителя; (7) – подача стружки. На рис.2 представлена стружка после однократного размола.

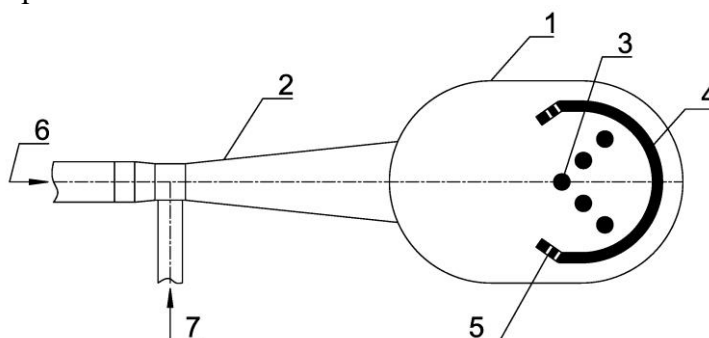


Рисунок 1. Кинематическая схема ударной мельницы.

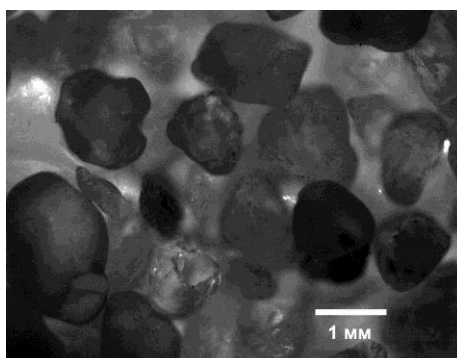


Рисунок 2. Стружка после однократного размола.

Литература

1. С.Е. Андреев и др. // Дробление, измельчение и грохочение полезных ископаемых. 3-е изд., перераб. и доп. - М.: "Недра". - 1980. - 415 с.
2. И.В. Постникова, В.Н. Блиничев, Я. Кравчик. Струйные мельницы. // "Современные наукоемкие технологии. Региональное приложение". - №2(42). - 2015.

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ TlFeS_2 и TlFeSe_2 : ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ.

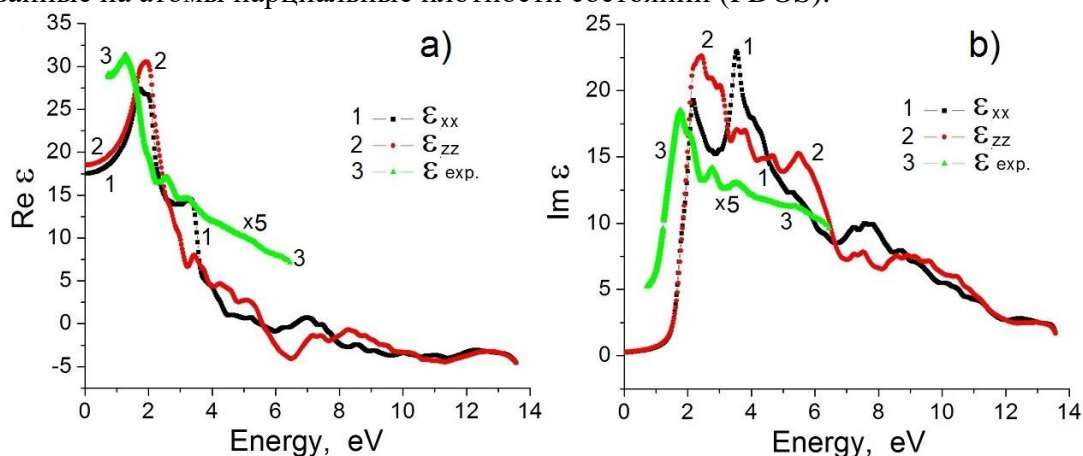
Бадалова З.И.¹, Джахангирли З.А.^{1,2}, Ализаде Э.Г.¹,
Мамедов Ф.Г.¹ Абдуллаев Н.А.^{1,2}

¹Институт физики Мин. науки и обр. Азербайджана, Баку, Азербайджан

²Бакинский Государственный Университет, Баку, Азербайджан

E-mail: abnadir@mail.ru

Нами получены и охарактеризованы методами рентгеновской дифракции, рамановской и инфракрасной спектроскопии кристаллы полупроводниковых магнитных соединений TlFeS_2 и TlFeSe_2 [1]. Ab initio расчеты электронных, в том числе оптических, свойств проводились на основе DFT с использованием метода полнопотенциальных линейризованных дополненных плоских волн (FP-LAPW), реализованного в коде Wien2k. Для экспериментального изучения оптических характеристик полупроводниковых соединений TlFeS_2 и TlFeSe_2 нами были проведены спектральные эллипсометрические исследования, основанные на определении изменения поляризации света в результате взаимодействия его с поверхностью кристаллов при отражении. Измерения проводились на эллипсометре оптического диапазона M-2000 DI (J.A. Woollam Co, Inc., US). На рисунке 1 приведены значения действительных $\text{Re } \epsilon$ (рис.1a) и мнимых $\text{Im } \epsilon$ (рис.1b) частей диэлектрической функции при различных энергиях для кристаллов TlFeS_2 . Кривые 1 и 2 теоретически рассчитанные величины диэлектрической функции для направлений вдоль осей x и z , соответственно. Кривая 3 – это экспериментально определённая величина диэлектрической функции для поликристаллического образца из эллипсометрических измерений. Отметим совпадение критических точек ($\partial\epsilon/\partial E = 0$) в зависимостях $\epsilon(E)$. В соединении TlFeS_2 для действительной части диэлектрической функции (рис. 1a) это энергия 3.3 eV, а для мнимой части диэлектрической функции – энергии 2.1, 2.8 и 3.5 eV. Также определена дисперсия коэффициентов преломления, экстинкции и поглощения. Оценена ширина прямой запрещённой зоны. Расчётами из первых принципов определена электронная зонная структура, происхождение энергетических состояний и проектированные на атомы парциальные плотности состояний (PDOS).



Литература

1. Велиев Р.Г., Абдуллаев Н.А., Амирасланов И.Р., Мамедова И.А., Мамедов Д.А., Алиева, Е.Р. Гудавасов Ш.К., Немов С.А. // Физ. и техн. полупров. – 2021. – Т. 55. - № 8.- С. 673-678.

АНАЛИЗ ДВОЙНИКОВЫХ ГРАНИЦ В УЛУЧШЕННОМ МЕТАЛЛУРГИЧЕСКОМ КРЕМНИИ, ВЫРАЩЕННОМ МЕТОДОМ НАПРАВЛЕННОЙ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Хорошева М.А.¹, Пещерова С.М.², Чуешова А.Г.², Вдовин В.И.³, Федина Л.И.³

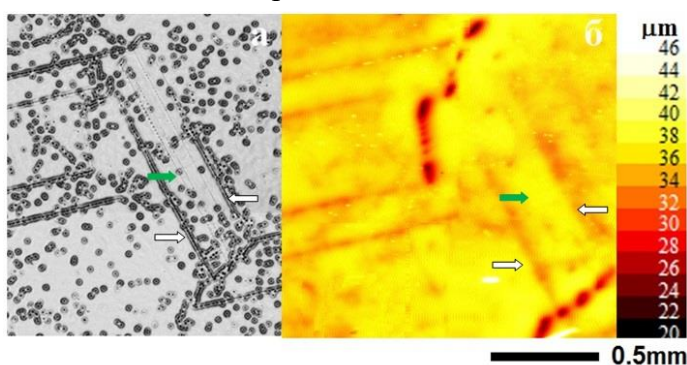
¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, Черноголовка, Россия, khor@issp.ac.ru

²Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геохимии им. А.П. Виноградова Сибирского отделения Российской академии наук, Иркутск, Россия

³Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, Россия

Используя методы селективного химического травления, EBSD, LBIC и программные пакеты MTEX и ATEX, исследованы двойниковые границы зерен в улучшенном металлургическом мультикремнии, выращенном методом направленной кристаллизации. Тонкая структура двойниковых границ, выявляемая специально разработанным травителем, предполагает, что не все границы, определяемые методом EBSD как $\Sigma 3$, являются ростовыми и значительная их часть может появляться вследствие выполнения определенных условий при кристаллизации, когда становится выгодным скольжение лидирующей частичной дислокации [1].

На рис.1 представлено оптическое изображение структуры двойниковых границ после селективного травления (слева) и карта диффузионной длины электронов (справа). Видно, что сильная электрон-дырочная рекомбинация наблюдается только на границах $\Sigma 3$ с большой плотностью дислокаций (белые стрелки). Там, где их плотность мала, рекомбинационная активность границ слабая (зеленая стрелка).



Наличие высокой плотности дислокаций на этих границах приводит к тому, что рекомбинационная активность границ сопоставима с границами случайного типа и малоугловыми границами, что может существенно повлиять на время жизни неосновных носителей и соответственно на КПД солнечных элементов, изготовленных из такого кремния.

Рис.1 (а) – оптическое изображение участка поверхности образца p-Si; (б) - карта L_D электронов для этого же участка.

Литература

1. M. Zahiri-Azar, P. Pirouz, K. P. D. Lagerlöf, Journal of Physics:ConferenceSeries **281** (2011) 012018. doi:10.1088/1742-6596/281/1/012018.

МАГНИТОСТИМУЛИРОВАННЫЕ ЭФФЕКТЫ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КРИСТАЛЛАХ ТРИГЛИЦИНСУЛЬФАТА

Иванова Е. С., Петржик Е. А., Волк Т. Р.

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия e-mail: ivanova.el.ser@gmail.com

В работе исследовали эффект “магнитной памяти” - долговременной релаксации макроскопических свойств немагнитных кристаллов после кратковременного воздействия магнитного поля. Влияние слабых магнитных полей на физические свойства немагнитных материалов исследуется давно [1-3]. В сегнетоэлектриках эффект “магнитной памяти” проявляется как изменение диэлектрических и родственных свойств в результате кратковременного воздействия магнитного поля [4-5].

Изучалось влияние постоянного магнитного поля на диэлектрические свойства сегнетоэлектрических кристаллов триглицинсульфата (TGS) с различными типами дефектов. Бали выбраны кристаллы TGS с примесью внедрения (примесь хрома Cr двух различных концентраций), и номинально чистый TGS с собственными дефектами, полученными в результате длительного воздействия переменного электрического поля, и для сравнения номинально чистые кристаллы TGS высокой степени совершенства. Образцы выдерживались в магнитном поле $B = 2$ Тл в течение 20 минут. Вектор магнитной индукции $\mathbf{B} \perp P_s$, $\mathbf{B} \parallel \mathbf{X}$. Измерения температурной зависимости диэлектрической проницаемости $\epsilon'(T)$ вблизи фазового перехода проводились до и после магнитной экспозиции. Было показано, что после магнитного воздействия величина диэлектрической проницаемости в окрестности фазового перехода возрастает (в случае TGS:Cr в 2 раза), а затем возвращается к исходному значению. Время достижения максимального изменения так же как и время последующей релаксации зависят от типа дефектной структуры кристалла.

Природа наблюдаемого явления предположительно связана с перестройкой дефектной структуры в магнитном поле, как это происходит при магнитоэластическом эффекте [1-3]. Преобразование дефектных комплексов влияет на пиннинг доменных стенок - одного из факторов, определяющих процессы переполяризации в сегнетоэлектриках. При измерении диэлектрических свойств после магнитной экспозиции движение доменных границ будет происходить в новой, преобразованной, дефектной структуре, состояние которой меняется во времени по мере релаксации. Значит наблюдаемая задержка в изменении электрических свойств после магнитного воздействия обусловлена медленными релаксационными процессами в дефектной структуре кристаллов.

Работа проводилась в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН.

1. Альшиц В.И., Даринская Е.В., Колдаева М.В., Петржик Е.А. // Кристаллография. - 2003. - Т. 48. - № 5. - С. 826.
2. Головин Ю.И. // ФТТ. - 2004. - Т. 46. - № 5. - С. 769.
3. Моргунов Р.Б. // УФН. - 2004. - Т. 174. - № 2. - С.131.
4. Гайнутдинов Р.В., Иванова Е.С., Петржик Е.А., Лашкова А.К., Волк Т.Р. // Письма в ЖЭТФ. - 2017. - Т. 106. - № 2. - С. 84.
5. Иванова Е.С., Петржик Е.А., Гайнутдинов Р.В., Лашкова А.К., Волк Т.Р. // ФТТ. - 2017. - Т. 59. - № 3. - С. 550.

ПОВЫШЕНИЕ РЕСУРСА РАБОТЫ СВЕРЛ ИЗ СТАЛИ P18 ПОСРЕДСТВАМ ЭЛЕКТРОВЗРЫВНОГО НАПЫЛЕНИЯ ПОКРЫТИЙ ИЗ КАРБИДА ВОЛЬФРАМА

Ващук Е. С., Романов Д.А.

*Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия,
vaschuk@bk.ru*

На поверхности сверл из стали P18 получено упрочняющее покрытие из карбида вольфрама. Покрытие формировали методом электровзрывного напыления. Данное покрытие повышает ресурс работы сверл. Кроме того возможно восстановление поверхности сверл этим же методом.



Рисунок 1 – Инструментальный набор сверл из стали P18. Поверхность сверл упрочнена покрытием из карбида вольфрама, полученным методом электровзрывного напыления

Сформированное покрытие имеет толщину до 200 мкм. В качестве прототипа промышленного образца готовой продукции на рисунке 1 приведен инструментальный набор сверл из стали P18 с упрочненной поверхностью за счет электровзрывного покрытия из карбида вольфрама. Произведены испытания с разной скоростью сверления различных материалов.

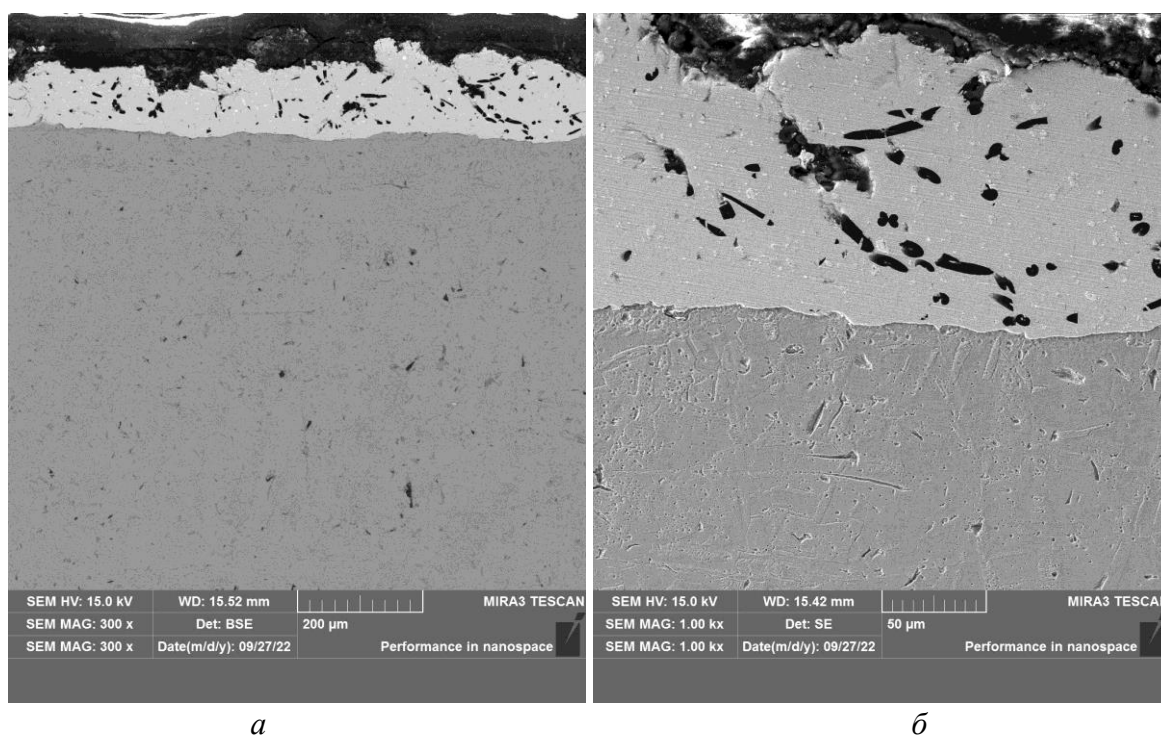
Исследование выполнено в научной лаборатории электровзрывного напыления высоконадежных покрытий, – создана согласно постановлению Правительства Кемеровской области – Кузбасса № 632 от 19 сентября 2022 г., соглашение № 8.

СТРУКТУРА ПОКРЫТИЙ СИСТЕМЫ С–Ag, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОВЗРЫВНОГО НАПЫЛЕНИЯ

Московский С.В.

Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия,
psk-svm@yandex.ru

На поверхности катодной меди марки М00к получено покрытие системы С–Ag. Покрытие формировали методом электровзрывного напыления. Для исследования структуры покрытий использовали метод сканирующей электронной микроскопии.



a – изображение, демонстрирующее однородность покрытия по толщине на протяженном участке покрытия, *б* – характерное изображение покрытия и подложки

Рисунок 1 – Структура покрытия системы С–Ag, полученного методом электровзрывного напыления. Световая микроскопия. Прямой шлиф

Покрытие имеет толщину до 200 мкм (рисунок 1, *a*). Покрытие обладает мелкодисперсной структурой (рисунок 1, *б*). По фазовому контрасту можно утверждать, что покрытие образовано светлой матрицей и черными включениями (рисунок 1, *б*). Матрица образована серебром, включения – углеграфитовым волокном. Это подтверждают результаты микрорентгеноспектрального анализа.

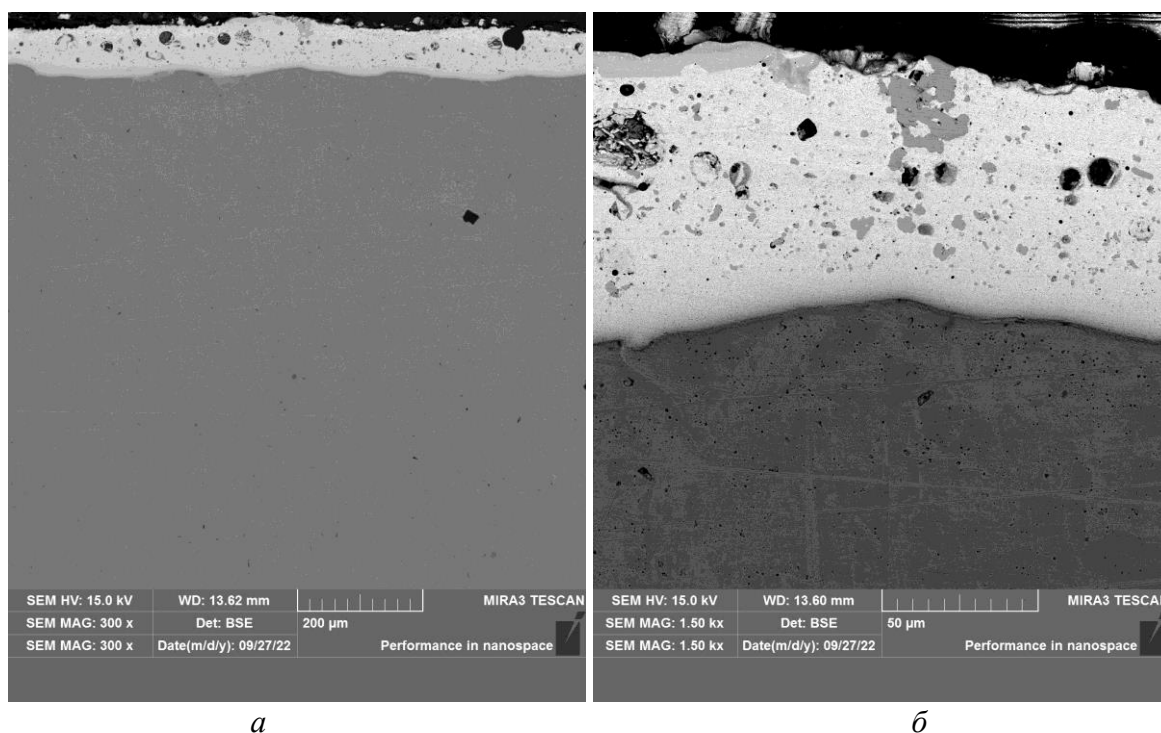
Исследование выполнено при финансовой поддержке Гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук МК-4292.2022.4. Электровзрывное напыление произведено с использованием оборудования научной лаборатории электровзрывного напыления высоконадежных покрытий, – создана согласно постановлению Правительства Кемеровской области – Кузбасса № 632 от 19 сентября 2022 г., соглашение № 8.

СТРУКТУРА ПОКРЫТИЙ СИСТЕМЫ Mo–Au–N, ПОЛУЧЕННЫХ КОМПЛЕКСНЫМ МЕТОДОМ

Почетуха В.В., Романов Д. А.

Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия,
v.pochetuha@mail.ru

На поверхности катодной меди марки М00к получено покрытие системы Mo–Au–N. Покрытие формировали последовательной трехстадийной обработкой. Сначала проводили электровзрывное напыление, затем электронно-пучковую обработку и азотирование на финишной стадии. Для исследования структуры покрытий использовали метод сканирующей электронной микроскопии.



a – изображение, демонстрирующее однородность покрытия по толщине на протяженном участке покрытия, *б* – характерное изображение покрытия и подложки

Рисунок 1 – Структура покрытия системы Mo–Au–N, полученного комплексным методом. Световая микроскопия. Прямой шлиф

Покрытие имеет толщину до 150 мкм (рисунок 1, *a*). Покрытие обладает мелкодисперсной структурой (рисунок 1, *б*). По фазовому контрасту можно утверждать, что покрытие образовано светлой матрицей и серыми включениями (рисунок 1, *б*). Матрица образована золотом, включения – молибденом. Данное высказывание подтверждают результаты микрорентгеноспектрального анализа.

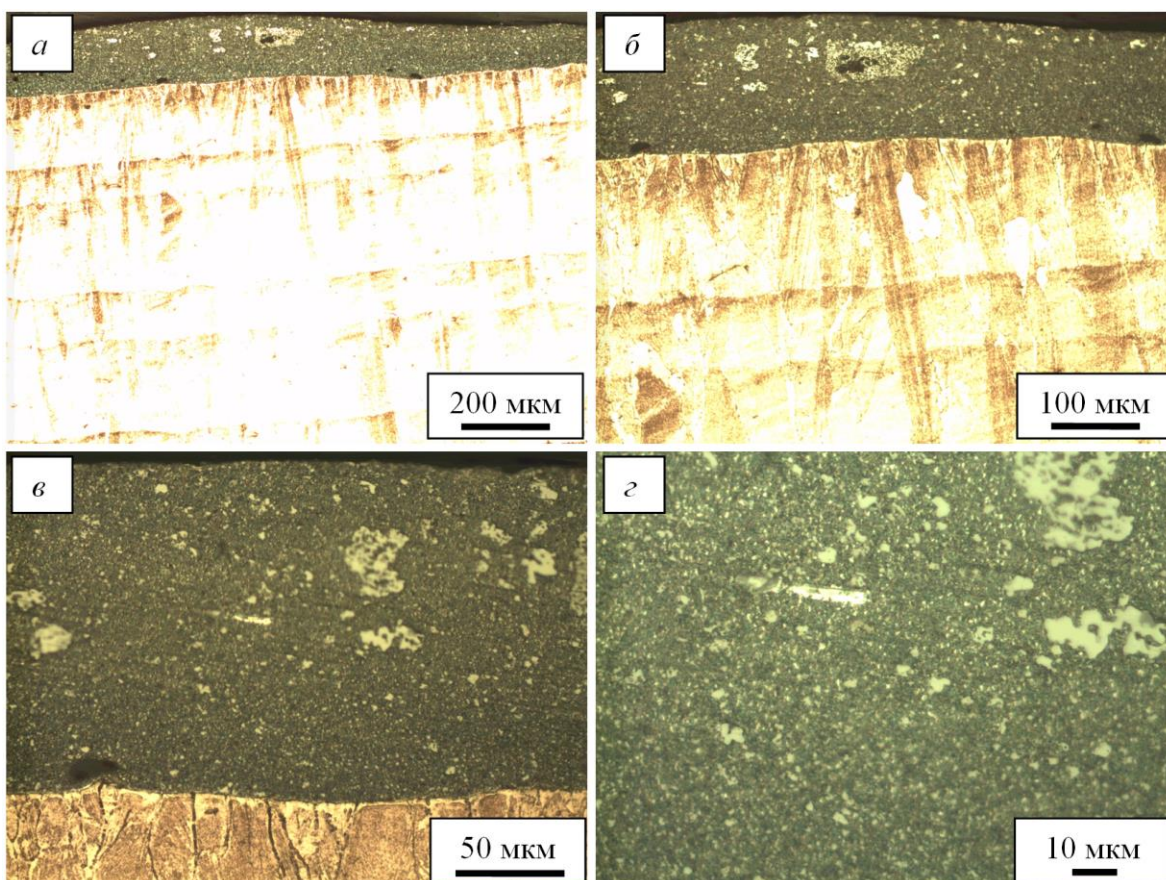
Работа выполнена в рамках государственного задания № 0809-2021-0013. Электровзрывное напыление произведено с использованием оборудования научной лаборатории электровзрывного напыления высоконадежных покрытий, – создана согласно постановлению Правительства Кемеровской области – Кузбасса № 632 от 19 сентября 2022 г., соглашение № 8.

СТРУКТУРА ПОКРЫТИЙ СИСТЕМЫ TiB_2-Ag-N , ПОЛУЧЕННЫХ КОМПЛЕКСНЫМ МЕТОДОМ

Романов Д. А., Почетуха В. В.

Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия,
romanov_da@physics.sibsiu.ru

На поверхности катодной меди марки М00к получено покрытие системы TiB_2-Ag-N . Покрытие формировали последовательной трехстадийной обработкой. Сначала проводили электровзрывное напыление, затем электронно-пучковую обработку и азотирование на финишной стадии. Для исследования структуры покрытий использовали металлографический микроскоп отечественного производства марки МЕТАМ ЛВ-42.



a – изображение, демонстрирующее однородность покрытия по толщине на протяженном участке покрытия, *б* – характерное изображение покрытия и подложки, *в* – изображение, демонстрирующее структуру на границе покрытия с подложкой, *г* – увеличенное изображение структуры покрытия
Рисунок 1 – Структура покрытия системы TiB_2-Ag-N , полученного комплексным методом. Световая микроскопия. Прямой шлиф

Покрытие имеет толщину до 200 мкм (рисунок 1, *a*). Также покрытие обладает мелкодисперсной структурой (рисунок 1, *г*).

«Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-79-10012, <https://rscf.ru/project/22-79-10012/>».

ОТЛИЧИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ В НАПРАВЛЕНИЯХ ВДОЛЬ И ПЕРПЕНДИКУЛЯРНО CuO –ПЛОСКОСТЯМ В ПЛЕНКЕ $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

Степанцов Е.А.

Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова ФНИЦ Кристаллография и фотоника РАН, г. Москва, Россия, E-mail: stepantsov@ns.crys.ras.ru

Высокотемпературная сверхпроводимость как явление вызывает повышенный интерес в течение нескольких последних десятилетий. Среди широкого спектра материалов обладающих этим свойством большое практическое применение в криогенной электронике по ряду причин находят монокристаллические пленки $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. Эти пленки в виду относительной технологической простоты традиционно выращиваются *c*-ориентированными, т.е. параллельными кристаллографической плоскости (001), однако, в последнее время проявился значительный интерес к выращиванию пленок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ориентации (100). Обусловлено это их более высокой перспективностью по сравнению с *c*-ориентированными пленками при создании ряда квантовых приборов, например, джозефсоновских переходов типа сэндвич, вследствие того, что длина когерентности в направлениях, перпендикулярных оси *c* значительно выше (~1.5-2.0 nm), чем вдоль нее (~0.2-0.3 nm). В настоящей работе предпринята попытка выявить проявление анизотропии сверхпроводимости в пленках $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ *a*-ориентации, т.е. (100).

Выращивание таких пленок проводилось на подложках из кристаллов SrLaGaO_4 , ориентации (100) и делалось это в два этапа. На первом из них методом магнетронного распыления осаждался буферный слой $\text{PrBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, далее поверх него путем лазерной абляции осуществлялся рост основной пленки $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$. На рис.1 представлен снимок, полученный с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ), из которого видно, что пленка состоит из доменов прямоугольной формы значительно удлиненных в *b*-направлении, т.е. [010] и вдоль CuO -сетки. В перпендикулярном им *c*-направлении, т.е. [001], зерна значительно сплюснуты в следствии анизотропии скоростей роста.

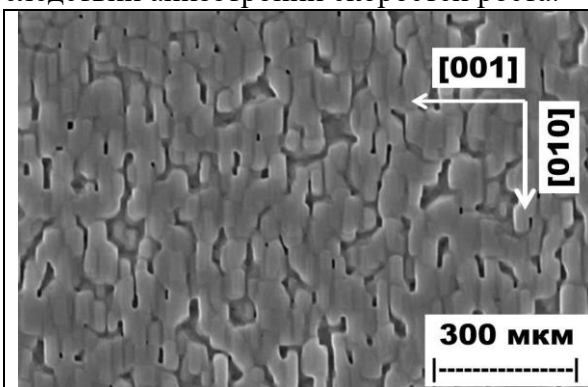


Рис. 1 СЭМ снимок поверхности *a*-ориентированной пленки $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$.

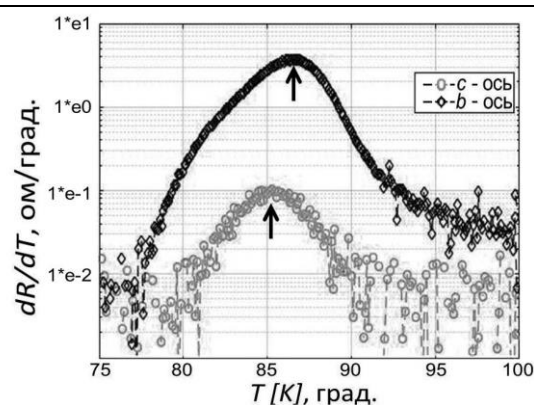


Рис. 2. Зависимость производной по температуре нормального сопротивления от температуры в *b*- и *c*-направлениях.

Как продемонстрировано на рис. 2, измерение на данных пленках температурной зависимости нормального сопротивления в окрестности перехода в сверхпроводящее состояние показало, что критическая температура такого перехода в *b*-направлении на 2 градуса выше, чем *c*-направлении.

Работа проведена в рамках выполнения исследований по Государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ ДЕФЕКТОВ В СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКАХ МЕТОДОМ АКТИВАЦИИ-РЕЛАКСАЦИИ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ.

Кузенко Д. В.

ГБУ «НИИ «Реактивэлектрон», г. Донецк, ДНР, РФ, danil.kuzenko.84@yandex.ru

В сегнетоэлектриках диэлектрическая проницаемость является структурно чувствительным параметром и зависит от его дефектного состояния. Одним из способов изучения дефектов структуры сегнетоэлектрика является определение энергетического спектра залегания его дефектных уровней методом активации-релаксации диэлектрической проницаемости, состоящий из двух этапов.

На первом этапе для этого проводится измерение температурной зависимости диэлектрической проницаемости $\varepsilon(T)$ и построение зависимости $\ln(\varepsilon)(1/T)$, которая разбивается на i линейных участков с дальнейшей их аппроксимацией линейным уравнением и определение из него энергии активации U_i для i -го процесса согласно уравнению: $\varepsilon_i(T) = a \cdot \exp(-U_i/k \cdot T)$. Далее для каждого значения энергии активации определяется физический механизм активации дефектных уровней структуры сегнетоэлектрика. Так, для сегнетоэлектрика $\text{Pb}(\text{Zr},\text{Ti})\text{O}_3$ было определено, что активационному процессу отрыву доменных стенок от кислородных вакансий соответствует энергия активации порядка 0,1 эВ, а активационному процессу миграции кислородных вакансий энергия активации порядка 1 эВ.¹

Вторым этапом метода активации-релаксации диэлектрической проницаемости является нагревание сегнетоэлектрика до определенной температуры T с последующей закалкой до комнатной температуры, после чего проводится измерение релаксации диэлектрической проницаемости к равновесному состоянию в течение нескольких часов $\varepsilon(t)$. В логарифмическом масштабе времени зависимости $\varepsilon(t)$ имеют линейный вид $\varepsilon(t) = -A \cdot \ln(t) + B$. На примере сегнетоэлектрика $\text{Pb}(\text{Zr},\text{Ti})\text{O}_3$ показано, что нагрев ниже определенной температуры деполяризации T_d , которая ниже температуры Кюри T_C , приводит к восстановлению диэлектрической проницаемости к значению до отжига. А нагревание при температурах выше температуры T_d приводит к уменьшению диэлектрической проницаемости.²

Сопоставление энергии активации, соответствующей процессу миграции кислородных вакансий, с тепловой энергией, соответствующей температуре T_d , показывает их равенство. Это означает, что процесс необратимого изменения диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрика $\text{Pb}(\text{Zr},\text{Ti})\text{O}_3$ является следствием активации его дефектов, которые являются центрами пиннинга для доменных стенок.

Таким образом, метод активации-релаксации диэлектрической проницаемости сегнетоэлектрика при нагреве позволяет определить энергии активации его дефектных уровней и определить температурные границы устойчивости его доменной структуры.

Литература

1. Kuzenko D.V. // J. Adv. Dielectrics. – 2022. – № 12 (3). – P. 2250010.
2. Kuzenko D.V., Ishchuk V.M., Bazhin A.I., Spiridonov N.A. // Ferroelectrics. – 2015. – № 474. – P. 156–162.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПРИМЕСНЫХ И РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В КРЕМНИИ, ЛЕГИРОВАННОМ ЗОЛОТОМ, ПРИ ТЕРМОРАДИАЦИОННОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Махкамов Ш.¹, Ташметов М.Ю.¹, Эрдонов М.Н.¹, Холмедов Х.М.²

¹Институт ядерной физики АН РУз, г. Ташкент, Узбекистан, e-mail: makhkamov@inp.uz
muzaffarerdonov1978@yandex.ru

²Ташкентский университет информационных технологий имени аль-Хорезми, г. Ташкент, Узбекистан

В технологии изготовления полупроводниковых изделий для регулирования их быстродействия часто используются способы введения центров рекомбинации путем диффузии различных примесей или радиационной обработкой. Среди примесей, создающих глубокие рекомбинационные дефектные центры в Si, золото занимает особое место из-за амфотерности свойств, компенсируя как n-, так и p-кремний. Однако электрически активная концентрация глубоких центров при термодиффузионном легировании кремния весьма ограничена и не позволяет регулировать быстродействие кремниевых приборов в широких пределах. В настоящей работе на примере кремния, легированного золотом, исследовано влияние термической обработки на трансформацию электрически активных центров золота после облучения гамма-квантами ^{60}Co . Диффузия Au проводилась в кремнии n- и p-типа с удельными сопротивлениями от 1 до 40 Ом · см при температурах 900 ÷ 1100 °С в течение 2 ÷ 5 часов из нанесенного на пластины раствора AuCl_3 , а облучение проводилось гамма-квантами ^{60}Co флюенсом $5 \cdot 10^{17} \div 10^{19} \text{ см}^{-2}$ с последующей термообработкой в интервале температур 200 ÷ 800 °С в течение 1 часа. Контроль концентрации глубоких центров Au и радиационных дефектов до и после терморadiационной обработки осуществлялся методом DLTS в $p^+ \text{-} n \text{-} p^+$ структурах, изготовленных из $\text{Si} \langle \text{Au} \rangle$. Установлено, что в спектрах DLTS диодов из легированного n- и p-Si появляются пики, связанные с акцепторным уровнем $E_c - 0.54 \text{ эВ}$ в n-Si и донорным уровнем $E_v + 0.34 \text{ эВ}$ в p-Si. Сопоставление их амплитуд при идентичных режимах диффузии показало, что концентрация электрически активных центров $E_c - 0.54 \text{ эВ}$ превышает практически в 8 раз по сравнению с центром $E_v + 0.34 \text{ эВ}$, что свидетельствует о непринадлежности сформированных центров к одному и тому же атому Au. Гамма облучение $\text{Si} \langle \text{Au} \rangle$ в указанном интервале доз приводит к понижению концентрации носителей тока из-за формирования компенсирующих радиационных дефектов, а время жизни неосновных носителей заряда уменьшается более чем на порядок по сравнению с необлученными образцами $\text{Si} \langle \text{Au} \rangle$. Изохронный отжиг облученных образцов $\text{Si} \langle \text{Au} \rangle$ в интервале температур 200 ÷ 800 °С показывает, что возрастание концентрации электрически активных центров золота в $\text{Si} \langle \text{Au} \rangle$ наблюдается в интервале температур отжига 400 ÷ 650 °С и достигает максимума при $T_0 = 600 \text{ °С}$. Установлено, что эффективность формирования электрически активного центра $E_v + 0.34 \text{ эВ}$ в образцах $\text{Si} \langle \text{Au} \rangle$ после терморadiационной обработки повышается в 6 раз по сравнению с рекомбинационным центром $E_c - 0.54 \text{ эВ}$. Обнаружено, что концентрация рекомбинационных центров Au в Si, сформированных при термообработке облученных образцов $\text{Si} \langle \text{Au} \rangle$, возрастает с повышением дозы облучения и зависит от степени легирования Au исходного кремния. Выявлены режимы терморadiационной обработки для оптимизации концентрации электрически активных центров Au в Si. Предлагается схема квазихимической реакции взаимодействия примесных и радиационных дефектов в твердом растворе $\text{Si} \langle \text{Au} \rangle$ при терморadiационном воздействии.

РАСЧЕТ СПЕКТРАЛЬНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОЭФФИЦИЕНТА ПОГЛОЩЕНИЯ МОДЕЛЬНОГО МАССИВА УНТ

Матасов М. Д.¹, Бармин А. А.¹, Рудштейн Р. И.¹, Ларченков А. С.¹

¹АО ГНЦ Центр Келдыша, Москва, РФ, matasov@kerc.msk.ru,
maxime.matasov@gmail.com

Для получения спектральной характеристики интегрального коэффициента поглощения идеализированного массива углеродных нанотрубок (УНТ), обладающего заданными параметрами, был разработан подход, основанный на полуклассическом приближении взаимодействия электромагнитного поля с веществом. В таком подходе детально рассматривается взаимодействие падающей электромагнитной волны на практически однородный массив ориентированных УНТ. Данное явление может быть описано либо при помощи решения системы уравнений Максвелла для эквивалентной диэлектрической проницаемости массива УНТ, либо при помощи детального рассмотрения воздействия электрического поля падающей ЭМ-волны на объемную структуру УНТ, в частности на атомы углерода и квазисвободные электроны π - электроны [1].

Взаимодействие электромагнитного поля с электронами представляет собой процесс поглощения энергии за счет индуцирования колебаний квазисвободных π -электронов, имеющих возможность почти свободно перемещаться по поверхности нанотрубки. Под действием поля падающей волны, квазисвободные электроны осуществляют плазменные колебания, рассеивая импульс на атомах цилиндрической структуры трубки [2]. В соответствии со значением времени релаксации импульса электрона τ и амплитудой смещения электрона x_0^* от электромагнитной волны атомной структуре углеродной нанотрубки передается определенное значение энергии. Данные процессы, описываются следующим уравнением.

$$qE_x(t, z) = m^* \frac{d^2 x^*}{dt^2} + \frac{m^* dx^*}{\tau dt}$$

Решение уравнения позволит найти амплитуду колебаний квазисвободных электронов около своих положений равновесия. На основе информации о таких параметрах, как диаметр нанотрубок и межосевое расстояние в модельном слое вертикально ориентированных углеродных нанотрубок, можно оценить концентрацию квазисвободных электронов. На основании найденной амплитуды колебаний, и объёмной концентрации квазисвободных электронов можно определить вектор поляризации, который возникает в вертикально ориентированном слое углеродных нанотрубок (ВОУНТ) за счет взаимодействия с электромагнитным полем.

Значения вектора поляризации является ключевой величиной в определении коэффициента экстинкции и, как следствие, коэффициента поглощения электромагнитной волне в ВОУНТ с заданными параметрами.

Литература

1. Slepchenkov M.M., Mitrofanov V.V., Nefedov I.S., Glukhova O.E. // Coating. – 2020. – V. 10. – P. 324. Doi:10.3390/coatings10050324
2. Мартинес-Дуарт Д. М. Нанотехнологии для микро- и оптоэлектроники: мир материалов и технологий. Москва: Техносфера, 2007. 368 с.

ДИАМЕТР-КОНТРОЛЬ РОСТ НАНОПРОВОЛОК Sb_2Te_3 С ПОМОЩЬЮ КАТАЛИЗАТОРА Au ПО МЕХАНИЗМУ ПЖК

Алабада Р.¹, Свайкат Н.², Самофалова А. С.³

¹*Al-Muthanna University, Coolege of nursing, 66001, Alsamawa, Iraq* abdalla.rusul@mail.ru

²*Воронежский государственный технический университет, Россия, г. Воронеж*
nada.s84@mail.ru

³*Воронежский государственный лесотехнический университет имени Г.Ф. Морозова, Россия, г. Воронеж* malinka.alya8@yandex.ru

В настоящей работе представлены результаты выращивания нанопроволок Sb_2Te_3 с фазовым переходом ННК с регулируемым диаметром на подложках Si продемонстрирован с помощью метода химического осаждения из паровой фазы ПЖК с использованием катализатора Au. Помимо размера катализатора Au, количество исходного порошка Sb_2Te_3 , необычный параметр роста, также используется для контроля диаметра ННК Sb_2Te_3 . Диаметр ННК Sb_2Te_3 явно увеличивается с увеличением как размера катализатора Au, так и количества порошка Sb_2Te_3 . Эффективно контролируя размер наночастиц Au и количество порошка Sb_2Te_3 , диаметр ННК Sb_2Te_3 можно регулировать в широком диапазоне от 145 до 275 нм.

По сравнению со сплавами $Ge_2Sb_2Te_5$ и $GeTe$, Sb_2Te_3 демонстрирует более низкую температуру кристаллизации и более быстрое обратимое переключение, что делает его идеальным кандидатом для реализации многоуровневых ячеек РСМ на основе гетероструктур, в которых противоположные свойства задействованных материалов могут быть объединены для улучшения общих характеристик. и за проведение фундаментальных исследований роли гетерограницы в резистивном переключателе [1,2].

1. Rao, F.; Song, Z.; Zhong, M.; Wu, L.; Feng, G.; Liu, B.; Feng, S.; Chen, B. Multilevel data storage characteristics of phase change memory cell with doublelayer chalcogenide films ($Ge_2Sb_2Te_5$ and Sb_2Te_3). *Jpn. J. Appl. Phys. Part 2 Lett.* 2007, 46, L25.

2. Chong, T.C.; Shi, L.P.; Wei, X.Q.; Zhao, R.; Lee, H.K.; Yang, P.; Du, A.Y. Crystalline amorphous semiconductor superlattice. *Phys. Rev. Lett.* 2008, 100, 136101

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПЛЁНКИ ПРОДУКТОВ ИЗНОСА (ТРЕТЬЕГО ТЕЛА) НА ТРЕНИЕ ВОЛОКНИСТОГО КОМПОЗИТА.

Шпенев А.Г.

ИПМех РАН им. А.Ю. Ишлинского, Москва, Россия, kel-a-kris@list.ru

В настоящее время в мире композиты применяются практически во всех отраслях промышленности. При этом наиболее перспективными являются композиты, армированные углеродными волокнами. Углеродным волокнам присущи экстремально высокие значения модуля упругости и прочности, химическая и термическая стойкость, низкий коэффициент линейного термического расширения, специфические трибологические свойства (они могут быть использованы как во фрикционных [1], так и в антифрикционных [2] узлах трения). Одним из перспективных направлений использования композитов на основе углеродного волокна являются высокотемпературные трибосопряжения на основе материалов с углеродной матрицей. Важной особенностью этих материалов является образование на поверхности трения плотной углеродной плёнки из продуктов износа, которая во многом определяет трибологические свойства композита [3].

С целью исследования этого явления была поставлена и решена задача об изнашивании композита жёстким контртелом, поверхности трения которых разделены слоем продуктов изнашивания. Волокнистый композит моделируется представительным объёмом в виде двух коаксильных цилиндров, третье тело моделируется вязкоупругим одномерным слоем. Свойства вязкоупругости слоя моделируются моделью Кельвина. Полученная модель изнашивания позволяет определить влияние свойств третьего тела на установившийся рельеф поверхности композита, деформацию поверхности трения и интенсивность её изнашивания. Установлено, что увеличение толщины плёнки приводит к уменьшению интенсивности изнашивания и росту шероховатости поверхности. Проведено сравнение полученных результатов с серией трибологических испытаний фрикционного углеродного композита в условиях, при которых образуется плёнка третьего тела разной толщины (разная геометрия поверхности контакта). Получено хорошее соответствие теоретических и экспериментальных результатов, как для шероховатости, так и для интенсивности износа.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №21-58-52006 МНТ_a

1. Cheng, H.; Xue, N.J.; Hou, W.Q. The application and development of carbon/carbon composites in aircraft and high-speed train braking systems. *Carbon* 2020, 184, 30–33.
2. Fei Lu, Liang Lu, Jian Liu, Xianjuan Pang and Chenfei Song. Tribological Properties and Wear Mechanism of C/C Composite Applied in Finger Seal // *Machines*, 2023, 11(2), 176.
3. Shpenev, A.G., Muravyeva, T.I., Shkalei, I.V., Bukovskiy, P.O. Influence of the Surface Film (Third Body) on the Friction and Wear Process of Carbon-Fiber Composites // *Journal of Surface Investigation*, 2022, 16(3), 397–401

КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СВОЙСТВ In_2Se_3 АБ ИНИТИО И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Х.В. Алигулиева¹, А.Ф. Талыфлы²

^{1,2}Сумгаитский государственный университет, AZ5008, Сумгаит, Азербайджан
xayala-firuza@mail.ru, talibli_aysel@mail.ru

Представлены результаты исследования колебательных свойств полупроводникового соединения In_2Se_3 теоретически, методом теории возмущений функционала плотности (DFPT), и экспериментально, с использованием рамановской спектроскопии. Сравнение измерений комбинационного рассеяния света и расчетов динамики решетки позволило нам идентифицировать четыре раман-активных моды, обнаруженных в 91.28, 104.5, 182.68 и 193.6 cm^{-1} . Идентификация фононных мод проводилась по рассмотрению точечной группы симметрии. Результаты идентификации фононных мод подтвердили $R3m$ -симметрию фазы $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$. Проведено также сравнение результатами с имеющимся в литературе экспериментальными данными, полученными методом рамановской спектроскопии. Рассчитанные частоты и симметрии фононных мод в центре зоны Бриллюэна хорошо согласуются с экспериментальными данными.

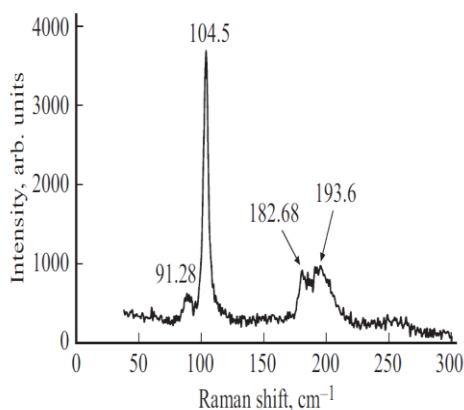


Рис. 1. Спектр комбинационного рассеяния света $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$.

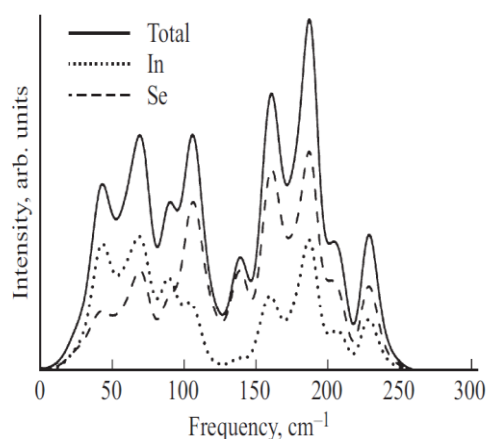


Рис. 2. Полная и проецированные на атомы плотности фононных состояний в $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$

Целью настоящей работы является исследование фононных спектров, определение симметрии фононных мод в центре ЗБ, сравнение результатов с экспериментальными данными, полученными из КР спектра, и на основе этого уточнить кристаллической симметрии данного образца In_2Se_3 .

В настоящей работе были проведены совместное экспериментальное и теоретическое исследование колебательных свойств $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$ с помощью измерений комбинационного рассеяния света, а также *ab initio* расчетами динамики решетки. Сравнение результатов комбинационного рассеяния света с расчетами из первых принципов, а также теоретико-групповой анализ позволили нам идентифицировать фононные моды $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$. Наше исследование подтвердило $R3m$ -симметрию фазы $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$ как подходящую пространственную группу.

Литература

- [1] J. Herrero, J. Ortega. Sol. Energy Mater. **16**, 6, 477 (1987).

- [2] M.S. Whittingam. *Prog. Solid State Chem.* **12**, 1, 41 (1978).
- [3] Q.L. Li, Y. Li, J. Gao, S.D. Wang, X.H. Sun. *Appl. Phys. Lett.* **99**, 24, 243105 (2011).
- [4] T. Zhai, X. Fang, M. Liao, X. Xu, L. Li, B. Liu, Y. Koide, Y. Ma, J. Yao, Y. Bando, D. Golberg. *ACS Nano* **4**, 3, 1596 (2010).
- [5] H. Lee, D.H. Kang, L. Tran. *Mater. Sci. Eng. B* **119**, 2, 196 (2005).
- [6] B. Yu, S. Ju, X. Sun, G. Ng, T.D. Nguyen, M. Meyyappan, D.B. Janes. *Appl. Phys. Lett.* **91**, 13, 133119 (2007).
- [7] Y.T. Huang, C.W. Huang, J.Y. Chen, Y.H. Ting, K.-C. Lu, Y.L. Chueh, W.W. Wu. *ACS Nano* **8**, 9, 9457 (2014).
- [8] X.B. Алигулиева, N.A Abdullayev, O.Z. Alekperov, V.N. Zverev, A.M. Kerimova, N.T. Mamedov *Journal of Thermoelectricity* **1**, 40 (2017)
- [9] X.B. Алигулиева, H.A. Абдуллаев, К.М. Джафарли, Л.Н. Алиева, С.Ш. Кахраманов, С.А. Немов *Физика и техника полупроводников*”, Санкт-Петербург, т.**51**, 7, 981 (2017)
- [10] Y. Zhou, D. Wu, Y. Zhu, Y. Cho, Q. He, X. Yang, K. Herrera, Z. Chu, Y. Han, M.C. Downer, H. Peng, K. Lai. *Nano Lett.* **17**, 9, 5508 (2017).

СУБМИКРОЧАСТИЦЫ ПОЛИ(D,L-ЛАКТИД-СО-ГЛИКОЛИДА) С ПОЛИ-ЭЛЕКТРОЛИТНОЙ ОБОЛОЧКОЙ, СОДЕРЖАЩИЕ КОБАЛАМИН**Ванян М.А.¹, Бусленко А.В.¹, Саруханова В.В.¹, Букреева Т.В.^{1,2}**¹НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия, E-mail miavan@yandex.ru²ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, E-mail tanika71@mail.ru

Субмикронные частицы сополимеров молочной и гликолевой кислот – поли(D,L-лактид-со-гликолидов) (PLGA), являются высокоперспективными носителями лекарственных веществ благодаря биосовместимости и биоразлагаемости этого полимерного материала [1, 2]. Метод послойной адсорбции противоположно заряженных полиэлектролитов (метод Layer-by-layer, LbL) является простым и эффективным способом модификации частиц поли(D,L-лактид-со-гликолида) (PLGA) и позволяет создавать системы «ядро-оболочка», перспективные в качестве носителей широкого спектра веществ.

В настоящей работе рассматриваются субмикрочастицы PLGA с полиэлектролитной оболочкой, содержащие модельное соединение (кобаламин). При этом для формирования оболочки были выбраны полиэтиленимин (PEI, поликатион) и натриевая соль сульфата декстрана (DS, полианион). Исходные частицы PLGA имели отрицательный заряд, поэтому для адсорбции первого полиэлектролитного слоя применяли поликатион. Адсорбция слоя PEI вызывает некоторое увеличение размера частиц (примерно на 15 нм), что может свидетельствовать об образовании плотной оболочки. Формирование следующего слоя (DS) приводит к существенному росту размеров частиц (на несколько десятков нм), что говорит о высокой рыхлости оболочки полианиона. Адсорбция каждого следующего полиэлектролитного слоя вызывает изменение дзета-потенциала по знаку и по абсолютной величине, что позволяет сделать выводы о высокой агрегативной устойчивости частиц.

Поскольку в молекуле кобаламина имеется несколько амидных группировок, представлялось целесообразным ввести его в модифицированные частицы PLGA после второго слоя, т.е. полианиона. Методом спектрофотометрии установлено, что содержание кобаламина на частицах с полиэлектролитной оболочкой составляет 8 % масс. (от содержания в исходном растворе, из которого проводили адсорбцию) и 5 % масс. (от массы частиц PLGA). Изучены некоторые закономерности высвобождения кобаламина. Для этого субмикрочастицы PLGA с полиэлектролитной оболочкой и содержащие кобаламин, суспендировали в воде и инкубировали при 25 °С в течение 6 сут. Далее суспензию выдерживали 2 сут при 37 °С (т.е. в условиях, близких к физиологическим). Установлено, что в первые часы высвобождается около 18% масс. инкапсулированного вещества, затем устанавливается некоторое равновесие. Повышение температуры до 37 °С приводит к увеличению десорбции модельного соединения до 29 % масс.

Работа выполнена при финансовой поддержке НИЦ «Курчатовский институт» с использованием оборудования Ресурсного центра оптической микроскопии и спектроскопии НИЦ «Курчатовский институт».

Литература

1. Danhier F., Ansorena E., Silva J.M. et al. // J. Controlled Release. – 2012. –V. 161. –№ 2. – P. 505-522.
2. Седуш Н.Г., Кадина Ю.А., Разуваева Е.В. и др. // Российские нанотехнологии. – 2021. – Т. 16. – № 4. – С. 462-481.

СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ИОННЫХ КОМПЛЕКСОВ ФУЛЛЕРЕНОВ**С.С.Хасанов¹, А.В. Кузьмин,¹ Д.В.Конарев²**

¹Учреждение Российской академии наук Институт физики твердого тела РАН,
Черноголовка, Россия, khasanov@issp.ac.ru

²Учреждение Российской академии наук Институт проблем
химической физики РАН, Черноголовка, Россия, konarev3@yandex.ru

В докладе рассматриваются структурные аспекты реализации магнитных и проводящих свойств в ионных соединениях фуллеренов, в которых за названные физические свойства ответственна подрешетка анион-радикалов фуллерена с той или иной топологией и конкретными геометрическими параметрами. К этим параметрам относятся: межмолекулярные расстояния, взаимная ориентация и собственная деформация молекулы фуллерена, которая определяет расщепление трехкратно вырожденного уровня НСМО (низшая свободная молекулярная орбиталь) и тем самым влияет на взаимодействие между соседями. Металлической проводимостью обладают комплексы, в которых подрешетка анионов фуллерена имеет однородную структуру. Обеспечение этой однородности при дизайне проводящих структур представляют собой непростую задачу. Были получены и исследованы кристаллы большого количества соединений с общей формулой $(D_A^+) \cdot (C_n^{-m}) \cdot (D_B) \cdot (P)$, где D_A – небольшая молекула катиона или сильного донора, способная ионизовать фуллерен, D_B – структурообразующая большая молекула, P – молекулы растворителя, C_n – C_{60} или C_{70} и m – их заряд. В докладе детально обсуждается, в частности, низкотемпературное поведение кристаллов $(MDABCO^+) \cdot (C_{60}^{\bullet-}) \cdot TPC$, где TPC – нейтральная молекула триптицена, а $MDABCO^+$ – катион метилдиазабициклооктана, в котором имеется устойчивая фуллереновая конфигурация в виде плотноупакованных гексагональных слоев, обладающая металлической проводимостью [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 22-23-01158.

Литература

1. Dmitri. V. Konarev, Salavat S. Khasanov, Akihiro Otsuka, Mitsuhiko Maesato, Gunzi Saito, Rimma N. Lyubovskaya, Angew. Chem. Int. Ed. 2010, 49, 4829-4832.

ВЛИЯНИЕ НАНОСТРУКТУРЫ НА ДЕГРАДАЦИЮ, АНТИСТОКСОВУЮ И АНОМАЛЬНУЮ ФЛУОРЕСЦЕНЦИЮ НАНОЧАСТИЦ НИТРИДА УГЛЕРОДА

П. В. Зинин, П. Гришаев, М.Ф. Булатов

Научно-технологический центр уникального приборостроения РАН

Несмотря на растущее число публикаций, посвященных использованию свойств графитоподобных нитридов углерода в различных технологических приложениях, систематического исследования влияния наноструктуры на оптические свойства соединений C-N не проводилось. Недавно было обнаружено, что интенсивность флуоресценции, возбуждаемой в сферических графитоподобных наночастицах нитрида углерода (*s*-C₃N₄), более чем на три порядка выше, чем у разупорядоченной модификации графитоподобного нитрида углерода (*g*-C₃N₄) [1]. Изучение флуоресценции наночастиц *s*-C₃N₄ также показало, что флуоресценция *s*-C₃N₄ имеет высокоинтенсивную антистоксовую часть [2].

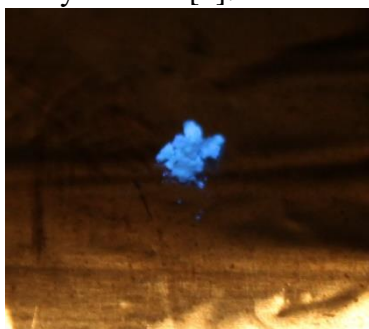


Рис. 1. Фотографии порошка *s*-C₃N₄, освещенного зеленым лазером мощностью 1500 МВт.

Фотография порошка *s*-C₃N₄, освещенного зеленым лазером мощностью 1500 МВт, показана на рис. 1. Порошок ярко-синего цвета, что указывает на то, что интенсивность флуоресценции переместилась в область более низкой длины волны при высокой мощности освещения.

Исследования влияния импульсного лазерного возбуждения с различными графитовыми структурами C₃N₄, включая *s*-C₃N₄ и неупорядоченные модификации *g*-C₃N₄, на антистоксовую флуоресценцию показали, что *s*-C₃N₄ наночастицы обладают ярко выраженным эффектом усиления антистоксовой флуоресценции *s*-C₃N₄ при освещении импульсным лазером (Рис. 1). Этот эффект не наблюдается для *g*-C₃N₄ наночастиц.

В настоящей работе экспериментально показано, что anomalous поведение флуоресценции *s*-C₃N₄ наночастиц связано с химической стабильностью *s*-C₃N₄ наночастиц в сравнение *g*-C₃N₄ наночастицами. Впервые проведено систематическое исследование процесса деградации *g*-C₃N₄ и подтверждено, что при длительном хранении *g*-C₃N₄ постепенно теряет свои флуоресцентные свойства, в то же время аномально высокая флуоресценция *s*-C₃N₄ наночастиц остается стабильной.

ЛИТЕРАТУРА

1. Zinin, P.V., A.V. Ryabova, V.A. Davydov, V. Khabashesku, S. Boritko, et al., Anomalous fluorescence of the spherical carbon nitride nanostructures. *Chemical Physics Letters*. **633** p. 95-98 (2015).
2. Zinin, P.V., L.C. Ming, S.K. Sharma, V.N. Khabashesku, X.R. Liu, et al., Ultraviolet and near-infrared Raman spectroscopy of graphitic C₃N₄ phase. *Chemical Physics Letters*. **472**(1-3) p. 69-73 (2009).

ИМПЛАНТИРУЕМОЕ БИОАКТИВНОЕ УСТРОЙСТВО НА ОСНОВЕ СПЛАВА ТИТАНА ДЛЯ ОСТЕОРЕКОНСТРУКЦИИ И ЛОКАЛЬНОЙ БИОТЕРАПИИ ОНКОЛОГИЧЕСКИХ БОЛЬНЫХ

Новрузов К. М.¹, Оганнисян Э. А.², Страумал Б. Б.³, Когтенкова О. А.³,
Соколова Д. В.^{1,4,5}, Киселевский М. В.^{1,3}, Анисимова Н. Ю.^{1,3}

¹ФГБУ «НМИЦ онкологии имени Н.Н. Блохина» Минздрава РФ, Москва, Россия,
nkeryam@gmail.com

²ФГБУ «НМИЦ радиологии» Минздрава РФ, Москва, Россия

³ИФТТ РАН, Черноголовка, Россия

⁴НИИ молекулярной и клеточной медицины ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов» им. Патриса Лумумбы, Москва, Россия

⁵Научный центр трансляционной медицины АНО ВО «Научно-технологический университет «Сириус», Сочи, Россия

Целью работы была разработка имплантируемого устройства для восстановительной хирургии черепно-челюстно-лицевой области после резекции опухоли и для профилактики местного рецидива онкологического заболевания. Материалы и методы. Заготовки изделий изготавливали из титанового сплава марки ВТ6 в виде дисков диаметром 1 см, толщиной 2 мм методом электроэрозионной резки. После шлифовки образцов выпиливали отверстия округлой формы диаметром 1-2 мм методом электроэрозионной резки, которые заполняли препаратом анти PD-1 методом компактирования. Прочность образцов исследовали, измеряя микротвердость по Бринеллю (H) и модуль Юнга (E) с помощью индентора Берковица. Противоопухолевую активность оценивали после их имплантации паратуморально мышам линии Balb/c nude с привитой подкожно аденокарциномой человека линии SKBR3, рассчитывая через 10 суток торможение роста опухоли в сравнении с контролем (без имплантации устройства). Результаты и обсуждение. Изучение прочности образцов показало, что $H = 5$ ГПа и $E = 120$ ГПа. Полученные значения близки к значениям означенных параметров металлоконструкций из сплавов титана, разрешенных для применения при остеореконструктивных операциях ($p > 0,05$). Под воздействием имплантированного устройства торможение роста опухоли у мышей составило $62 \pm 8\%$ в сравнении с контролем поскольку релиз анти PD-1 из скаффолда рецепторы блокировал PD-1, ассоциированные с активированными лимфоцитами, что позволило в полной мере реализовать их противоопухолевый потенциал. Вывод. Разработанное устройство имеет перспективы применения при остеореконструкции и для биотерапии онкологических больных с целью предотвращения местного рецидива опухоли у пациентов после условно-радикальных операций.

2D MAGNETS: PERSPECTIVES AND INSIGHTS**Kartsev A. I.^{1,2}**¹*Computing Center of Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences (CC FEB RAS), 680063 Khabarovsk, Russia, karec1@gmail.com*²*Peoples Friendship University of Russia (RUDN University), 6 Miklukho-Maklaya St, Moscow, 117198, Russian Federation.*

2D magnets are materials with a quasi-two-dimensional crystal structure and exhibiting magnetic properties [1]. Most of them are layered materials, where atoms located in the same crystallographic plane have a special magnetic structure, which allows them to pose unique properties [2]. Two-dimensional magnets can be obtained in many ways, including thin films creating, exfoliating from bulk materials [3] or by assembling quantum dots [4]. The prototypical case of a 2D magnets is MX_3 compounds - van der Waals materials consisting of halogens X and d/f -metals M atomic layers. Where magnetic metal atoms form a graphene-like honeycomb-like sublattice. These compounds have vast of unique properties: giant second harmonic generation, magnetic structure dependence on the layers stacking, magnetic state switching under tension, pressure, or under an external field.

Those unique properties make 2D magnets a promising platform for real-world applications in various fields of science and technology, including medicine, electronics, nanotechnology, and others [5]. Two-dimensional magnets can be used as a gas sensor that can detect environmental pollution by hazardous gases even at low concentrations [6]. 2D magnets are of immense importance for studying the fundamental properties of matter too. These systems allow to study the interaction between localized magnetic moments in quasi-two-dimensionality described by various 2D Heisenberg-like models. Therefore, it will help to understand deeper the magnetic mechanisms in real systems by open avenue for creating new materials with unique properties [7].

References

1. Gibertini M. et al. Magnetic 2D materials and heterostructures //Nature nanotechnology. – 2019. – T. 14. – №. 5. – C. 408-419.
2. Kartsev A. et al. Biquadratic exchange interactions in two-dimensional magnets //npj Computational Materials. – 2020. – T. 6. – №. 1. – C. 150.
3. Kazim S. et al. Mechanical exfoliation and layer number identification of single crystal monoclinic CrCl_3 //Nanotechnology. – 2020. – T. 31. – №. 39. – C. 395706.
4. Liu X. et al. Designing two-dimensional versatile room-temperature ferromagnets via assembling large-scale magnetic quantum dots //Nano Letters. – 2021. – T. 21. – №. 22. – C. 9816-9823.
5. Elahi E. et al. A review on two-dimensional (2D) magnetic materials and their potential applications in spintronics and spin-caloritronic //Computational Materials Science. – 2022. – T. 213. – C. 111670.
6. Negedu S. D. et al. Energy Harvesting from Atomically Thin Co_2Te_3 //The Journal of Physical Chemistry C. – 2022. – T. 126. – №. 30. – C. 12545-12553.
7. Wang Q. H. et al. The magnetic genome of two-dimensional van der Waals materials //ACS nano. – 2022. – T. 16. – №. 5. – C. 6960-7079.

ИССЛЕДОВАНИЕ АНОМАЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ДИСЛОКАЦИОННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В КРЕМНИИ

Терещенко А. Н.¹, Зотов А. А.^{1,3}, Королев Д. С.², Никольская А. А.², Михайлов А. Н.², Белов А. И.², Тетельбаум Д. И.²

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия, tan@issp.ac.ru

²Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», г. Нижний Новгород, Россия

³Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», г. Москва, Россия

В данной работе обсуждаются полученные экспериментальные результаты по влиянию термообработок на температурную зависимость люминесценции дислокационных структур, сформированных путем облучения кремния ионами Si^+ и последующей дополнительной имплантации ионов B^+ . Установлено, что дополнительные отжиги исследуемых образцов могут приводить к сильному смещению максимума интенсивности линии D1 на температурной зависимости как в сторону высоких температур, так и в низкотемпературную область, причем положение максимума и его интенсивность определяется длительностью термообработок (рис. 1). В работе показано, что применением дополнительных термообработок можно значительно увеличить интенсивность ДЛ во всем температурном диапазоне измерений и особенно в его высокотемпературной части.

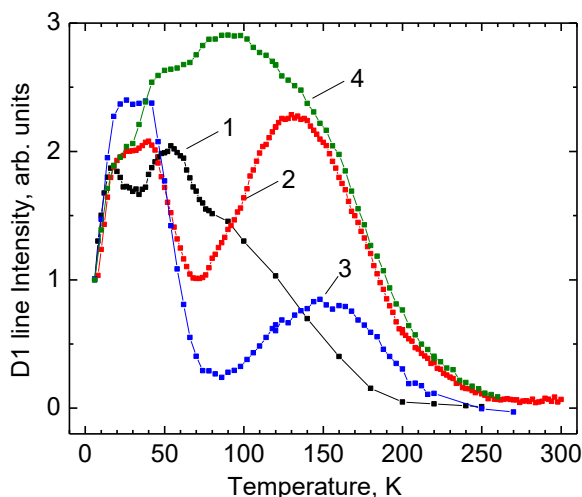


Рисунок 1. Зависимость интенсивности полосы D1 от температуры для исходного образца (1) и после дополнительных отжигов различной длительности при температуре 830 °C: (2) – 1 час, (3) – 3 часа, (4) – 5 часов. Кривые нормированы на интенсивность при 6 К.

Полученные экспериментальные данные хорошо согласуются с предложенным нами ранее механизмом, ответственном за наблюдаемое anomальное поведение ДЛ: максимумы на температурной зависимости могут быть связаны с термическим высвобождением носителей заряда с борсодержащих комплексов и последующим их захватом на D1-центры, что приводит к увеличению накачки центров D1 люминесценции, т.е. повышению интенсивности люминесценции с повышением температуры кристалла.

Результаты, полученные в данной работе, важны для разработки технологических решений по внедрению кремниевых оптических межсоединений внутри чипа, что является на сегодняшний день насущной потребностью микроэлектроники.

ДИСЛОКАЦИОННАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ В ИОННО-ИМПЛАНТИРОВАННОМ КРЕМНИИ

Зотов А. А.^{1,3}, Терещенко А. Н.¹, Королев Д. С.², Никольская А. А.², Михайлов А. Н.², Белов А. И.², Тетельбаум Д. И.²

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки *Институт физики твердого тела имени Ю.А. Осипьяна Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия, tan@issp.ac.ru*

²Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «*Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*», г. Нижний Новгород, Россия

³Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ*», г. Москва, Россия

В настоящее время главной проблемой кремниевой оптоэлектроники является создание эффективного источника излучения, роль которого выполняет светодиод или лазер на кремниевой основе. Однако в силу непрямозонности Si, излучательная рекомбинация в нем на несколько порядков ниже, чем в прямозонных полупроводниках. Одним из возможных решений этой проблемы является использование излучательной рекомбинации на дислокациях в кремнии. Среди различных методов генерации дислокаций особое место занимает создание центров дислокационной люминесценции (ДЛ) методом имплантации ионов кремния с последующей термообработкой. Однако одним из главных препятствий к практическому использованию ДЛ является ее сильное температурное гашение.

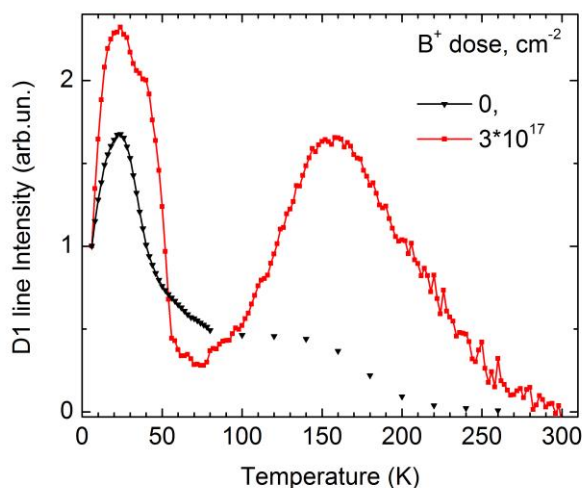


Рисунок 1. Зависимость интенсивности полосы D1 от температуры для образцов без дополнительной имплантации B^+ и с дополнительной имплантацией B^+ дозой $3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$.

Образцы прошли дополнительные отжиги при температуре 830°C в течение 1 часа.

Кривые нормированы на интенсивность при 6 К.

В данной работе приводятся экспериментальные результаты, показывающие, что различные термические обработки ионно-имплантированного кремния сильно влияют на температурную зависимость интенсивности линии D1 ДЛ. Например, в результате дополнительных отжигов наблюдалось возникновение интенсивных максимумов в области высоких температур на кривой температурной зависимости (рис.1). Установлено, что наблюдение такого поведения ДЛ возможно только в случае дополнительной имплантации примеси бора в дислокационную область кристалла. В работе обсуждается возможный механизм возникновения наблюдаемой температурной зависимости линии D1 ДЛ.

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА МАССИВНЫХ ОБРАЗЦОВ И БЫСТРОЗАКАЛЕННЫХ ЛЕНТ ФЕРРИМАГНИТНЫХ СПЛАВОВ ГЕЙСЛЕРА Mn-Co-V-Ga

Муртазин А. А.¹, Середина М. А.¹, Карпенков Д. Ю.^{1,2}, Горшенков М. В.¹,
Ховайло В. В.¹

¹Национальный исследовательский технологический университет МИСИС, Москва,
Россия, E-mail: a@mbash.ru

²Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Москва,
Россия

В последние десятилетия особое внимание привлекают сплавы Гейслера, представляющие собой скомпенсированные ферримагнетики. Их использование может позволить значительно минимизировать потери энергии, поскольку они не создают внешних полей рассеивания. Полностью скомпенсированный ферримагнетизм был теоретически предсказан в системе Mn-Co-V-Ga [1, 2]. Основными недостатками синтезированных до сих пор полностью скомпенсированных ферримагнетиков были низкие температуры Кюри и компенсации.

Были синтезированы однофазные образцы $Mn_{2-2x}Co_{0,55+x}V_{0,35+x}Ga_{1,1}$, ($x = 0; 0,125; 0,25$) в виде слитков и быстроокаленных лент, исследованы их магнитные свойства в температурном диапазоне 100 – 700 К. Толщина полученных лент была от 8,73 мкм до 32,7 мкм и уменьшалась при увеличении скорости вращения барабана. Температурные зависимости намагниченности образцов (рисунок 1) в большинстве случаев имели вид, типичный для ферримагнетиков р-типа. Температуры Кюри составляли 624, 544, 497 К и 621, 537, 498 К для массивных образцов и лент соответственно, что дает материалам потенциальную возможность использования в области спинтроники. Величина коэрцитивной силы для быстроокаленных лент, полученных при скорости вращения барабана 30 м/с, при $T = 300$ К составляла 343,8; 385,2 и 547,7 Э для $x = 0; 0,125; 0,25$ соответственно. Можно также отметить, что спиннингование смещает возможные температуры компенсации в область низких температур.

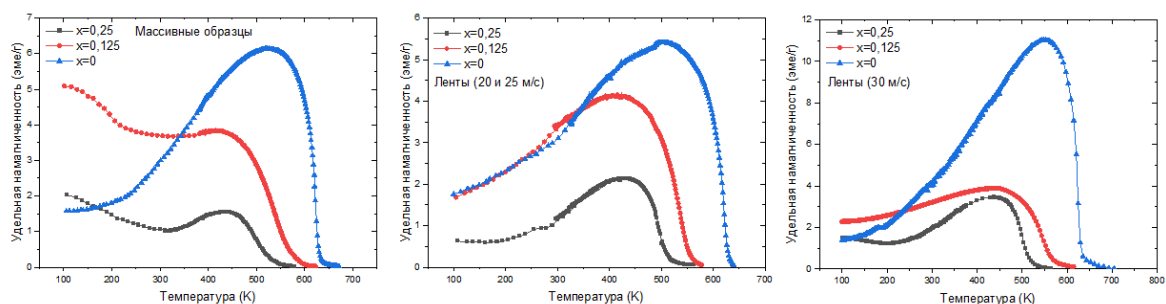


Рисунок 1 – Температурные зависимости удельной намагниченности массивных образцов и быстроокаленных лент сплавов Гейслера $Mn_{2-2x}Co_{0,55+x}V_{0,35+x}Ga_{1,1}$, ($x = 0; 0,125; 0,25$)

Литература

1. R. Dhakal Nepal S. et.al. Effect of doping on SGS and weak half-metallic properties of inverse Heusler Alloys // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. –2020. –Vol.503. –P.166588
2. I. Galanakis. et.al. Doping of Mn_2VAl and Mn_2VSi Heusler alloys as a route to half-metallic antiferromagnetism // Phys. Rev. B. –2007 –Vol.75. –P.092407.

ИССЛЕДОВАНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КВАРЦА, ИМПЛАНТИРОВАННОГО ЦИНКОМ

Привезенцев В.В.¹, Куликаускас В.С.², Киселев Д.А.³,
Воронова М.И.³, Сенатулин Б.Р.³

¹ФГУ НФЦ НИИСИ РАН, Москва, Россия, E-mail: v.privezentsev@mail.ru

²НИИЯФ, МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия, E-mail:

³НИТУ МИСИС, Москва, Россия, E-mail: dm.kiselev@misis.ru, mvoron@bk.ru

Представлены результаты исследования кристаллического кварца, имплантированного ионами $^{64}\text{Zn}^+$ с дозой $5 \times 10^{16}/\text{см}^2$ и энергией 40 кэВ. Имплантированные образцы размером 10×10 мм отжигались в окислительной среде с шагом 100°C в течение 1 ч на каждом шаге в диапазоне температур от 400 до 900°C .

Морфология поверхности образцов была исследована с помощью сканирующего зондового микроскопа MFP-3D Stand Alone (Asylum Research) в полуконтактной моде (AC Air Topography). Исследование фазового состава образцов проводили с использованием рентгеновского дифрактометра DISCOVERY D8 (Bruker) с длиной волны 1.54Å (Cu-K α излучение) в скользящей геометрии с углом падения рентгеновских лучей на поверхность образца 0.3° .

Обнаружено, что после имплантации в приповерхностном слое зафиксированы фазы металлического цинка и углерода. После отжига при 500°C в образцах появляется фаза ZnO, а после отжига при 800°C появляется фаза Zn_2SiO_4 , а содержание в образце фазы ZnO снижается. Установлено, что после отжига при 500°C шероховатость увеличивается на 2 порядка величины по сравнению с состоянием после имплантации, а после отжига при 800°C шероховатость поверхности кварца снижается на порядок величины по сравнению с отжигом при 500°C . После отжига при 800°C поверхность кварца становится очень развитой и на ней зафиксированы многочисленные Zn-содержащие кластеры и кратеры и образуется фаза оксида цинка ZnO. После отжига при 900°C происходит полная деградация фазы оксида цинка и в образце доминирует фаза силицида цинка Zn_2SiO_4 .

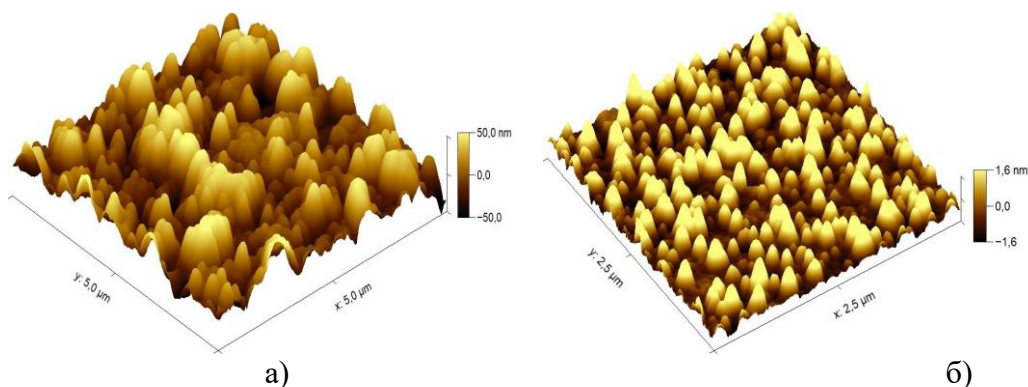


Рис.1. 3D АСМ-изображения поверхности кварца после имплантации (а) и после отжига при 800°C (б).

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в рамках госзадания ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН № FNEF-2022-0003 "Исследование нейроморфных систем обработки больших данных и технологии их изготовления" (1021060808723-2-1.2.1). АСМ исследования выполнены на оборудовании ЦКП «Материаловедение и металлургия» в НИТУ МИСИС (соглашение № 075-15-2021-696).

Научное издание

Физика конденсированных состояний

Сборник тезисов III Международной конференции
(29 мая – 2 июня 2023 г., Черноголовка)

Публикуется в авторской редакции

ISBN 978-5-6045956-6-4

