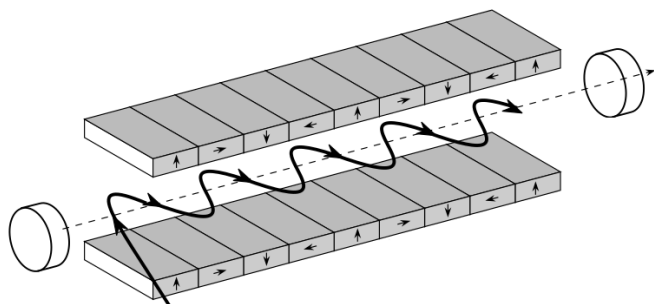


Воронежский государственный университет



**ВЫСОКОТОЧНАЯ ДИАГНОСТИКА
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ
МАТЕРИАЛОВ:
ЛАБОРАТОРНЫЕ И СИНХРОТРОННЫЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ**

Сборник тезисов

*IV Всероссийской молодежной конференции
(г. Воронеж, 30 сентября – 5 октября 2024 г.)*

Под общей редакцией
доктора физико-математических наук,
доцента *С. Ю. Турищева*



Воронеж
Издательско-полиграфический центр
«Научная книга»
2024

УДК 620.22(06)
ББК 30.377я431
В93

Высокоточная диагностика функциональных материалов: лабораторные и синхротронные исследования : сборник тезисов IV Всероссийской молодежной конференции (г. Воронеж, 30 сентября – 5 октября 2024 г.) / под общ. ред. С. Ю. Турецова. – Воронеж : Издательско-полиграфический центр «Научная книга», 2024. – 242 с. — ISBN 978-5-4446-1973-5. — Текст : непосредственный.

Сборник содержит тезисы устных докладов четвертой всероссийской молодежной конференции «Высокоточная диагностика функциональных материалов: лабораторные и синхротронные исследования» (г. Воронеж, 30 сентября – 5 октября 2024 года).

Конференция организована в рамках Проекта Воронежского государственного университета «Распределенная инфраструктура высокоточных методов диагностики в ультрамягкой рентгеновской области синхротронного излучения для функциональных материалов и наноразмерных структур, включая био-нано-гибридные, для перспективных технологий и технических систем: от образовательных технологий через фундаментальные научные исследования к практическому применению» Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на период до 2030 года и дальнейшую перспективу.

Основную структуру конференции составили устные доклады молодых учёных по следующим направлениям, связанным с развитием синхротронной диагностики материалов и наноразмерных структур для перспективных технологий и технических систем, включая принципиально новую природоподобную компонентную базу.

УДК 620.22(06)
ББК 30.377я431

ISBN 978-5-4446-1973-5

© ВГУ, 2024
© Оформление.
Издательско-полиграфический центр
«Научная книга», 2024

Содержание

| | |
|---|----|
| АНАЛИЗ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ МЕТОДОМ EXELFS-СПЕКТРОСКОПИИ Бакиева О.Р. | 16 |
| ЭФФЕКТЫ АДсорбЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННОЙ СЕГРЕГАЦИИ КАК ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КАТАЛИЗАТОРОВ Бухтияров А.В., Стахеев А.Ю., Бухтияров В.И. | 17 |
| СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЕВЫХ НАНОСТРУКТУР ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ВИРУСОВ И БАКТЕРИЙ Гончар К.А. | 19 |
| РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ XANES В НАНОКОМПОЗИТАХ ПЕРЕМЕННОГО СОСТАВА $(\text{COFeZR})_x(\text{MGF}_2)_{100-x}$ С НЕЛИНЕЙНЫМИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМИ СВОЙСТВАМИ Э.П. Домашевская, А.С. Ивков, А.А. Гуда, Л.В. Гуда, А.В. Ситников..... | 20 |
| ИСТОЧНИК СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЦКП "СКИФ" : ПРОГРЕСС С РЕАЛИЗАЦИЕЙ ПРОЕКТА Зубавичус Я.В., Бухтияров А.В..... | 23 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ЗАРЯДОВ ИОНОВ AN В ANO_2 ($\text{AN} = \text{TN} - \text{LR}$) Тетерин Ю.А., Путков А.Е., Рыжков М.В., Тетерин А.Ю., Иванов К.Е., Калмыков С.Н., Петров В.Г. | 24 |
| РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВИСМУТСОДЕРЖАЩИХ НИОБАТОВ И ТАНТАЛАТОВ, ДОПИРОВАННЫХ АТОМАМИ 3D-МЕТАЛЛОВ Некипелов С.В., Жук Н.А., Петрова О.В., Бакина К.А., Скандяков Р.Н., Рудковский В.О., Лебедев А.М., Чумаков Р.Г., Сивков В.Н. | 26 |
| МЕТРОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ИЗМЕРЕНИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРИБОРНЫХ КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР Николичев Д.Е., Бобров А.И., Нежданов А.В., Убийвовк Е.В., Трушин В.Н., Сидоренко К.В., Хазанова С.В., Малехонова Н.В., Юртова Е.И. | 28 |
| КРЕМНИЕВЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ С ЗОЛОТЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ: УСИЛЕНИЕ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ ДЛЯ АНАЛИЗА КЛЕТОК Осминкина Л.А. | 31 |

| | |
|---|----|
| ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ НАНОКОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ КОМПЛЕМЕНТАРНОГО НАБОРА МЕТОДОВ НА ПРИМЕРЕ МООС/MWCNT Сивков В.Н. | 34 |
| ФОТОЭМИССИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ АНАЛИЗА ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И МАГНЕТИЗМА СОЕДИНЕНИЙ ЛАНТАНОИДОВ Д. Ю. Усачёв..... | 35 |
| ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА СВЕРХПРОВОДЯЩИХ И МАГНИТНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ Фролов А.С. | 37 |
| НАНО- И МИКРОМАТЕРИАЛЫ КАК МОДУЛЯТОРЫ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ФЕРМЕНТОВ Холявка М.Г., Гончарова С.С., Редько Ю.А., Лавлинская М.С., Сорокин А.В., Кондратьев М.С., Артюхов В.Г. | 39 |
| ВОЗМОЖНОСТИ СПЕКТРОСКОПИИ В МЯГКОМ РЕНТГЕНОВСКОМ ДИАПАЗОНЕ НА СТРОЯЩЕЙСЯ УСТАНОВКЕ «СИЛА» Г. ПРОТВИНО Чумаков Р.Г. | 41 |
| ДИАГНОСТИКА МЕТАЛЛСОДЕРЖАЩИХ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ С УГЛЕРОДНЫМИ МАТРИЦАМИ: КОРРЕЛЯЦИЯ СОСТАВ-СТРУКТУРА-СВОЙСТВА Яловега Г.Э. | 43 |
| МЕТОДЫ ДИАГНОСТИКИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ КРИСТАЛЛОВ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДИЭЛЕКТРИКОВ И ПОДОБНЫХ МАТЕРИАЛОВ Яшина Л.В. | 44 |
| ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ СТРУКТУРА СИСТЕМЫ 3D-МЕТАЛЛ – ЛЕГКИЙ ЭЛЕМЕНТ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ СОВМЕСТНОГО АНАЛИЗА EXAFS И EXELFS ДАННЫХ. Аверкиев И.К., Бакиева О.Р. | 45 |
| СЕЛЕКТИВНОЕ ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ХЛОРА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ СЕНСОРАМИ ZNO Аль Хабиб А.А.К., Куликов М.Ю., Белов М.Ю., Шапошник А.В., Рябцев С.В. | 47 |
| АДСОРБЦИЯ ДИПОЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ C60F18 НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЯХ Андреев А.А., Чумаков Р.Г. | 48 |

| | |
|---|----|
| МОДИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МАГНИТНОГО ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА MnV_2Te_4 ПРИ КОНТАКТЕ СО СЛОЯМИ МАГНИТНЫХ АТОМОВ СО И ТЯЖЕЛЫХ АТОМОВ AU Анферова В.В., Шикин А.М., Тарасов А.В. | 49 |
| ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ AG В ПЛЕНКАХ AG-SI, ПОЛУЧЕННЫХ ИОННО-ЛУЧЕВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ Бабаков В.В., Барков К.А., Терехов В.А., Ивков С.А., Нестеров Д.Н. | 51 |
| КОМПЛЕКСНЫЕ СПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НР- МОДИФИЦИРОВАННОГО ФУЛЛЕРИТА C_{70} Бакина К.А., Петрова О.В., Скандаков Р.Н., Рутковский В.О., Некипелов С.В., Сивков В.Н. | 53 |
| ФОРМИРОВАНИЕ МЕТАСТАБИЛЬНОЙ ФАЗЫ Al_3Si В ПЛЕНКАХ AL- SI, ПОЛУЧЕННЫХ МАГНЕТРОННЫМ И ИОННО-ЛУЧЕВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ Барков К.А., Терехов В.А., Ивков С.А., Домашевская Э.П., Курганский С.И., Моисеев К.М., Хыдырова С.Ю., В.Р. Радина, Керсновский Е.С., Польшин И.В., Нестеров Д.Н., Буйлов Н.С., Ситников А.В. | 55 |
| НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ ПОКРЫТИЯ КОБАЛЬТА НА ПОВЕРХНОСТИ ПОРИСТОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ Барышев А.О., Валеев Р.Г. | 57 |
| РФЭС ИССЛЕДОВАНИЯ ТОНКИХ МАГНЕТРОННЫХ ПЛЕНОК ОКСИДА ТИТАНА Бельтюков А.Н., Чукавин А.И., Валеев Р.Г., Картапова Т.С. | 59 |
| СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛЕНОК ОКСИДА ЖЕЛЕЗА НА ПОРИСТОМ ОКСИДЕ АЛЮМИНИЯ А.Н. Бельтюков, Р.Г. Валеев, А.А. Петков | 61 |
| ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА $V_{1.8}Mn_{0.1}In_{0.1}Se_3$ И $V_{1.8}Co_{0.1}In_{0.1}Se_3$ ПО ДАННЫМ ФОТОЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ Беляев Д.В., Радзивончик Д.И., Титова С.Г., Голяшов В.А., Кох К.А., Терещенко О.Е., Чумаков Р.Г., Кузнецова Т.В. | 62 |
| СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУМЕРНЫХ КАРБИДОВ ТИТАНА (MXENES) Березкина А.Е., Аверкиев И.К. | 63 |
| ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ И СОСТАВ ТОНКИХ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ И МАГНЕТРОННЫХ СЛОЕВ ОКСИДА ОЛОВА ПО ДАННЫМ СИНХРОТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ Н.И. Бойков, С.С. Титова, О.А. Чувенкова, С.В. Рябцев, Е.В. Парина, Р.Г. Чумаков, А.М. Лебедев, К.А. Фатеев, С.Ю. Турищев | 65 |

| | |
|---|----|
| ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ БИНАРНЫХ АССОЦИАТОВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК Ag_2S И PbS , ПАССИВИРОВАННЫХ ТИАКАРБОНОВЫМИ КИСЛОТАМИ Смирнов М.С., Возгорькова Е.А., Бондарева Е.С. | 67 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛ-ДОПИРОВАННЫХ КЛАСТЕРОВ ОЛОВА КОМБИНИРОВАННЫМ МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО DFT-ЭКСПЕРИМЕНТА И ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ Борщ Н.А., Переславцева Н.С., Максимова Е.И. | 69 |
| ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ПЕРСПЕКТИВНЫХ НАНОКЛЕТОЧНЫХ ТЕРМОЭЛЕКТРИКОВ СИСТЕМЫ $Va-CD-Si$ Борщ Н.А., Переславцева Н.С., Радина В.Р. | 72 |
| ГАЗОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ОТДЕЛЬНЫХ НАНОНИТЕЙ SnO_2 И ЗОЛЬ-ГЕЛЬ НАНОКОМПОЗИТОВ SnO_2 Шапошник А.В., Звягин А. А., Брежнев Н.Ю., Турищев С.Ю., Чувенкова О.А., Арефьева О.А., Рябцев С.В. | 74 |
| ФОРМИРОВАНИЕ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ В НАНОРАЗМЕРНЫХ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ MO/V_4C Бугаев А.В., Сахоненков С.С., Шапошников Р. А., Полковников В. Н., Филатова Е. О. | 75 |
| СОСТАВ И ПРОТЯЖЁННОСТЬ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ В МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ Ru/V_4C В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СООТНОШЕНИЯ ТОЛЩИН СЛОЁВ И ТЕМПЕРАТУРНОГО ОТЖИГА Бугаев А.В., Сахоненков С.С., Полковников В. Н., Филатова Е. О. | 77 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА АМОРФНЫХ ПЛЕНОК SiO_x С НАНОКЛАСТЕРАМИ КРЕМНИЯ МЕТОДОМ УЛЬТРАМЯГКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ Васильева Е. С., Барков К. А., Терехов В.А., Теруков Е.И., Ундалов Ю.К., Трапезникова И.Н., Ивков С.А., Мониц Н.В., Минаков Д.А., Попова Е.В. | 79 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МОНОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ АТОМНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ Pt ПО ДАННЫМ СПЕКТРОСКОПИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ Викленко И.А., Дурьманов В.А., Срабионян В.В., Гладченко-Джевелекис Я.Н., Авакян Л.А., Бугаев Л. А. | 81 |
| ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ Ag_2S В НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНКАХ $Ag-SiO_x$, ПОЛУЧЕННЫХ ИОННО-ЛУЧЕВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ С.И. Высочкина, К.А. Барков, Ю.Н. Власов, В.А. Терехов, С.А. Ивков, Н.С. Буйлов, А.К. Пелагина, Е.С. Керсновский, И.В. Польшин | 82 |

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДОЛИ АТОМОВ ПЛАТИНЫ В
БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦАХ ТИПА ЯДРО-ОБОЛОЧКА В
АНСАМБЛЕ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВАНИИ ИНФОРМАЦИИ О
РАДИАЛЬНОМ РАСПРЕДЕЛЕНИИ АТОМОВ С ПОМОЩЬЮ
НЕЙРОННОЙ СЕТИ

Гладченко-Джевелекис Я.Н., Авакян Л.А., Срабионян В.В., Беленов С.В.,
Дурьманов В.А.84

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЛЕГИРОВАНИЯ ПЛЕНОК
ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ ФОСФОРОМ ПО
УЛЬТРАМЯГКИМ РЕНТГЕНОВСКИМ ЭМИССИОННЫМ СПЕКТРАМ

Горбунова А.Н., Барков К.А., Терехов В.А., Медведев Н.М., Скиданов А.А.,
Ивков С.А., Керсновский Е.С., Польшин И.В.86

ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ И
РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМЕРНОГО
КОМПОЗИТА

Грапенко О.Ю., Власенко В.Г., Гороховский А.В., Горшков Н.В.89

ИССЛЕДОВАНИЕ ГРАДИЕНТНОГО ИЗМЕНЕНИЯ ХИМИЧЕСКОГО
СОСТАВА НАНОРАЗМЕРНОЙ ПЛЕНКИ $Ti_xO_{(1-x)}$

Гусейнов Т.З., Бакиева О.Р., Валеев Р.Г., Картапова Т.С., Бельтюков А.Н.,
Хаметова Э.Ф.92

ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК В
ПРИСУТСТВИИ ПЛАЗМОННЫХ НАНОЧАСТИЦ

Дерепко В.Н.94

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ ГИДРОЛИЗАТОВ
КОЛЛАГЕНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗЛИЧНЫХ ФЕРМЕНТОВ.....

Евдокимова Е.Е., Жирякова А.В., Антипов С.С.96

ИССЛЕДОВАНИЯ ОСТАТОЧНЫХ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ В
МНОГОПЕРИОДНЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ GAN/ALN, ВЫРАЩЕННЫХ
НА ПОДЛОЖКЕ SIC/SI

Еремеев К. А., Курило Н.А., Середин П.В., Голошапов Д.Л., Буйлов Н.С.,
Леньшин А.С., Радама А.О., Мизеров А.М., Шарофиддинов Ш.Ш.97

СТРУКТУРА МЕДНЫХ ЦЕНТРОВ ЦЕОЛИТОВ ТИПА CU-MOR,
ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЖИДКОФАЗНОГО СИНТЕЗА

Ермакова А.М., Сухарина Г.Б., Гладченко-Джевелекис Я.Н., Поносова Е.Е.
Бабаянц А.С., Кулаев К.Д., Прядченко В.В., Авакян Л.А., Бугаев Л.А.99

ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАЦИИ КРЕМНИЕВЫХ НАНОНИТЕЙ
ЗОЛОТОМ, СЕРЕБРОМ И БИМЕТАЛЛОМ AUAG НА УСИЛЕНИЕ
СИГНАЛА КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ НА ПРИМЕРЕ
МОЛЕКУЛЫ РОДАМИНА 6G

Ерохина А.А., Иваненко И.П., Осминкина Л.А. 100

| | |
|---|-----|
| <p>ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И СОСТОЯНИЯ ПОЛУМЕТАЛЛОВ ДИРАКА И ВЕЙЛЯ В ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ИЗОЛЯТОРЕ ВИДА $MN_{1-x}Ge_xV_2Te_4$ Ерыженков А.В., Тарасов А.В., Шикин А.М.....</p> | 102 |
| <p>ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКОЕ РАССЛОЕНИЕ КАРБИДА КРЕМНИЯ В СТРИМЕРНОМ РАЗРЯДЕ Жукалин Д.А., Долгих И.И., Битюцкая Л.А., Солдатенко С.А., Синельников А.А.....</p> | 104 |
| <p>НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОЛЛОИДНЫХ РАСТВОРОВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК Ag_2Se, ПАССИВИРОВАННЫХ 2-МЕРКАПТОПРОПИОНОВОЙ КИСЛОТОЙ В ПОЛЕ 10 НС ИМПУЛЬСОВ $YAG:ND^{3+}$ ЛАЗЕРА А.И. Звягин, И.Г. Гревцева, С.В. Асланов, М.С. Смирнов, О.В. Овчинников ...</p> | 107 |
| <p>ЗАВИСИМОСТЬ УДЕЛЬНОГО ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ НА ПЕРЕМЕННОМ ТОКЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ <i>DLC</i>-ПОКРЫТИЙ ОТ СТРУКТУРЫ Зур И.А., Леоненко В.Ю.....</p> | 109 |
| <p>ОПРЕДЕЛЕНИЕ СПИНОВОГО СОСТОЯНИЯ ИОНОВ МАРГАНЦА В МОНОКРИСТАЛЛЕ $La_{0.4}Pr_{0.3}Ca_{0.3}MnO_3$ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ Кангур И.Э., Ярмошенко Ю.М., Бебенин Н.Г., Гребенников В.И., Миляев М.А., Чумаков Р.Г., Кузнецова Т.В.....</p> | 112 |
| <p>ИСЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И ФАЗОВОГО СОСТАВА ПЛЕНОК <i>CU-SI</i>, ПОЛУЧЕННЫХ ИОННО-ЛУЧЕВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ МЕТОДАМИ УМРЭС И РФЭС Керсновский Е.С., Барков К.А., Польшин И.В., Терехов В. А., Ивков С.А., Чукавин А.И., Буйлов Н.С., Ситников А.В.....</p> | 113 |
| <p>ОСАЖДЕНИЕ ЗОЛОТА НА ПОРИСТОМ КРЕМНИИ МЕТОДОМ ВАКУУМНО-ТЕРМИЧЕСКОГО НАПЫЛЕНИЯ Ким К.Б., Черненко С.С., Чукавин А.И., Нифталиев С.И., Леньшин А.С. ...</p> | 115 |
| <p>ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА <i>NEHAFS</i> ДЛЯ ПОИСКА ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ РЕАЛИЗАЦИИ МОРФОТРОПНОЙ ГРАНИЦЫ ДЛЯ НАНОПЛЁНОК $La(Y):HF_{0.5}ZR_{0.5}O_2$ Конашук А.С., Филатова Е.О., Лев Л.Л., Черникова А.Г., Зенкевич А.В.</p> | 116 |
| <p>ВЛИЯНИЕ МОЛЕКУЛ ТЕТРАЦИКЛИНОВОГО РЯДА НА ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК Ag_2S, ПАССИВИРОВАННЫХ МОЛЕКУЛАМИ ТИОГЛИКОЛЕВОЙ КИСЛОТЫ Кондратенко Т.С., Зябкина М.М., Овчинников О.В., Лачинов Д.А., Гревцева И.Г.....</p> | 119 |

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА И ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ
СВОЙСТВ ПЛЕНОК Nb-Si, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ
МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ

Коржова Т.А., Барков К.А., Терехов В.А., Хадырова С., Моисеев К.М., Ивков С.А., Керсновский Е.С., Польшин И.В., Новолокина Н.В..... 121

ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА СТРУКТУРУ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ
ХИМИЧЕСКИ ОСАЖДЕННЫХ НИКЕЛЕВЫХ ПОКРЫТИЙ

Кошелева О.К., Буйлов Н.С., Нестеров Д.Н., Ильина Е.А., Чукавин А.И., Столповская Н.В..... 123

СОВРЕМЕННЫЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ДЛЯ
РАЗРАБОТКИ НОВЫХ АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ ПРЕПАРАТОВ НА
ОСНОВЕ БЕЛОК-ПОЛИСАХАРИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ

Лавлинская М.С., Сорокин А.В., Гончарова С.С., Кондратьев М.С., Файзуллин Д.А., Зуев Ю.Ф., Холявка М.Г., Артохов В.Г. 126

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКОГО
МОДУЛЯТОРА НА ОСНОВЕ ЭФФЕКТА ОБЕДНЕНИЯ СВОБОДНЫХ
НОСИТЕЛЕЙ

Лаврухина Е. А., Бобров А. И., Нежданов А. В., Сидоренко К. В., Хомицкий Д. В..... 128

КРЕМНИЕВЫЙ ТЕРМООПТИЧЕСКИЙ ФАЗОВРАЩАТЕЛЬ ДЛЯ
УПРАВЛЕНИЯ ИНТЕРФЕРОМЕТРОМ МАХА-ЦЕНДЕРА

Лемешевская Г.А., Скрылев А.А., Нежданов А.В., Сидоренко К.В., Бобров А.И., Николичев Д.Е. 130

ОСОБЕННОСТИ ОСАЖДЕНИЯ МЕДИ НА ПОРИСТЫЙ КРЕМНИИ
МЕТОДОМ ВАКУУМНОГО ТЕРМИЧЕСКОГО ИСПАРЕНИЯ

Леньшин А.С., Черненко С.С., Ким К.Б. Ивков С.А., Гречкина М. В., А.И. Чукавин..... 133

ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОНАМИ С ЭНЕРГИЕЙ 8 МЭВ НА
ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ЛЕГИРОВАННЫХ ИНДИЕМ КРИСТАЛЛОВ Cu_2Sns_3

Лобанов А.Д., Ю.В. Корх, М.А. Сулимов, Е.И. Патраков, Д.И. Радзивончик, В.И. Гребенников, Ш. Накамура, М.Н. Сарычев, Р.Г. Чумакова, В.Ю. Иванов, Т.В. Кузнецова 135

ЦЕНТРЫ СВЯЗЫВАНИЯ ЦИНКА В АЛЬБУМИНЕ: XANES
ИССЛЕДОВАНИЯ

Лысенко В.Ю., Пронина Е.В., Кременная М.А., Яловега Г.Э. 137

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ
РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В НЕДИСПЕРГИРУЮЩИХ
ОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ

Макаров П.А., Скандаков Р.Н., Некипелов С.В., Сивков В.Н. 138

| | |
|---|-----|
| ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА FEBI ₂ TE ₄ | 140 |
| Макеев Р.В, Тарасов А.В., Шикин А.М. | |
| ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ УСКОРЕННЫМИ ЭЛЕКТРОНАМИ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ГЕКСАФЕРРИТОВ БАРИЯ ВАФЕ _{11.12} TI _{0.46} AL _{0.42} O ₁₉ . | 141 |
| Маслова С.А., Корх Ю.В., Живулин В.Е., Пономарева Е.А., Лобанов А.Д., Сарыгчев М.В., Ярмошенко Ю.М., Винник Д.А., Иванов В.Ю., Кузнецова Т.В. | |
| ИССЛЕДОВАНИЕ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА SESO ₂ P ₂ МЕТОДОМ СКАНИРУЮЩЕЙ ТУННЕЛЬНОЙ МИКРОСКОПИИ | 142 |
| Минаев А.А., Фролов А.С., Столяров В.С. | |
| ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПЛЕНОК SiO _x С НАНОКЛАСТЕРАМИ КРЕМНИЯ, ПОЛУЧЕННЫХ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИМ ОСАЖДЕНИЕМ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ | 144 |
| Монид Н.В., Барков К.А., Терехов В.А., Керсновский Е.С., Польшин И.В., Минаков Д.А. | |
| КОМПОЗИТНЫЕ НАНОКОНТЕЙНЕРЫ НА ОСНОВЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ И ЗОЛОТА ДЛЯ КОНТРОЛЯ ЗАГРУЗКИ И ВЫХОДА ЛЕКАРСТВА МЕТОДОМ ГКР-СПЕКТРОСКОПИИ | 147 |
| Назаровская Д.А., Васильева М.И., Самсонова Ж.В., Осминкина Л.А. | |
| ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МАГНИТНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ НА ОСНОВЕ MNVI ₂ TE ₄ | 149 |
| Наумов А.А. ¹ | |
| ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИТНОГО ЭЛЕКТРОДНОГО МАТЕРИАЛА NI- PANI@GO | 151 |
| Недоедкова О.В., Яловега Г.Э. | |
| ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ИОНОВ SR ²⁺ НА МЕЖПЛОСКОСТНЫЕ РАССТОЯНИЯ В ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ КРИСТАЛЛАХ ХРОМИТОВ ЛАНТАНА И ГАДОЛИНИЯ | 153 |
| Немых Я.М., Кострюков В.Ф. | |
| ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ПОДЛОЖЕК НА СТРУКТУРНОЕ СОВЕРШЕНСТВО И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК CD ₃ AS ₂ | 155 |
| Нечушкин Ю.Б., Маренкин С.Ф. | |

| | |
|---|-----|
| EXAFS-ИССЛЕДОВАНИЯ ПЛЕНОК ОКСИДА ЖЕЛЕЗА Р.Г. Валеев, А.А. Петков, В.В. Кривенцов | 157 |
| РАСПРЕДЕЛЕНИЕ СИЛ ОСЦИЛЛЯТОРОВ РЕНТГЕНОВСКИХ ПЕРЕХОДОВ В ОБЛАСТИ NEXAFS C1S-КРАЯ ПОГЛОЩЕНИЯ НОРГ Петрова О.В., Некипелов С.В., Бакина К.А., Сивков В.Н..... | 159 |
| ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КРАСИТЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ АЗОЛОТРИАЗИНОВ С БЕЛКАМИ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ Плешкова М.Н., Черных Ю.А., Вандышев Д.Ю., Антипов С.С. | 162 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СОДЕРЖАНИЯ МЕДИ НА СТРУКТУРУ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ПЛЕНОК CU-SI, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ИОННО-ЛУЧЕВОГО РАСПЫЛЕНИЯ Польшин И.В., Барков К.А., Керсновский Е.С., Терехов В. А., Ивков С.А., Буйлов Н.С., Ситников А.В. | 164 |
| МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТИ АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА $Ge_{0.4}Mn_{0.6}Bi_2Te_4$ Пономарев Е.В., Фролов А.С., Усачёв Д.Ю., Столяров В.С. | 166 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ РЕДКОЗЕМЕЛЬНОГО ИНТЕРМЕТАЛЛИДА $TbCO_2$ МЕТОДОМ РЕЗОНАНСНОЙ ФОТОЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ Пономарева Е.А., Чумаков Р.Г., Маслова С.А., Гребенников В.И., Герасимов Е.Г., Мушников Н.В., Кузнецова Т.В. | 169 |
| РАСЧЕТ ОСЦИЛИРУЮЩЕЙ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ К-КРАЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ДЛЯ СТРУКТУР С РАЗНЫМ БЛИЖАЙШИМ ОКРУЖЕНИЕМ АТОМОВ ОДНОГО СОРТА Потуданский Г.П., Курганский С.И. | 170 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ДОПОЛНИТЕЛЬНЫХ ЦЕНТРОВ СВЯЗЫВАНИЯ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА И ЦИНКА В МОЛЕКУЛЕ ГЕМОГЛОБИНА, ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СПЕКТРОВ XANES Пронина Е. В., Кременная М. А., Лысенко В.Ю., Яловега Г.Э. | 173 |
| СТРУКТУРА СПЕКТРА РФЭС ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ И ПРИРОДА ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ В MDO_2 Тетерин Ю.А., Рьжков М.В., Пугков А.Е., Маслаков К.И., Тетерин А.Ю., Иванов К.Е., Калмыков С.Н., Петров В.Г..... | 175 |

| | |
|---|-----|
| БАЙЕСОВСКАЯ РЕКОНСТРУКЦИЯ ВАЛЕНТНЫХ ПАРЦИАЛЬНЫХ ПЛОТНОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ (XPS) Радзивончик Д.И., Гребенников В.И., Беляев Д.В., Кох К.А., Чумаков Р.Г., Кузнецова Т.В. | 177 |
| МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МОНООКСИДА МЕДИ Радина В.Р. | 179 |
| РАЗГАДЫВАНИЕ МЕХАНИЗМА ПОЯВЛЕНИЯ АКТИВНОГО ФОТОПРОТЕИНА: ТЕОРЕТИКО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ Рогова А.В., Щугорева И. А., Маликова Н. П., Высоцкий Е. С., Томилиן Ф.Н | 181 |
| ВЛИЯНИЕ УСИЛЕНИЯ ЛОКАЛЬНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ АГРЕГАТОВ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА НА СПЕКТРЫ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИОНОВ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТРИЦАХ Д. С. Рубаник, В. В. Срабионян, В. А. Дурьманов, И. А. Викленко, Л. А. Авакян, М. П. Ветчинников, Г. Ю. Шахильдян, В. Н. Сигаев, Л. А. Бугаев .. | 183 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ОПТИЧЕСКИХ ПОСТОЯННЫХ В ОБЛАСТИ 1S ПОРОГА ИОНИЗАЦИИ 3D ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ КРАМЕРСА КРОНИГА Рутковский В.О., Бакина К.А., Петрова О.В., Сивков Д.В., Скандаков Р.Н. , Некипелов С.В., Сивков В.Н. | 185 |
| СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КОНТАКТНЫХ СЛОЕВ GAN, N-GAN И N ⁺ -GAN, СИНТЕЗИРОВАННЫХ МЕТОДОМ РА МВЕ НА ВИРТУАЛЬНЫХ ПОДЛОЖКАХ GAN/C-AL ₂ O ₃ П. В. Середин, Д. Л. Голощапов, Д. Е. Костомаха, Я. А. Пешков, Н. С. Буйлов, А. А. Гайворонская, А. М. Мизеров, С. Н. Тимошнев, М. С. Соболев, Е. В. Убыйвовк, В. И. Земляков, П. Л. Пармон, П. П. Куцько | 187 |
| ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ НАБОРА КОМПЛЕМЕНТАРНЫХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ Скандаков Р.Н. | 188 |
| ИК ФОТОДЕТЕКТОРЫ НА КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ: ДОСТИЖЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ Смирнов М.С., Овчинников О.В. | 191 |

| | |
|--|-----|
| ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ NI-SI-MO В МНОГОСЛОЙНЫХ КОРОТКОПЕРИОДНЫХ СИСТЕМАХ ДО И ПОСЛЕ ОТЖИГА Соломонов А.В., Филатова Е.О., Полковников В.Н. | 193 |
| ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ПЛАСТИФИЦИРУЮЩИХ ДОБАВОК НА СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИОННЫХ СУПЕРАБСОРБЕНТОВ КОМПЛЕКСОМ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ Сорокин А.В., Лавлинская М.С. | 195 |
| АТОМНАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЦЕНТРОВ МЕТАЛЛОВ В СТЕКЛАХ $ZnO-P_2O_5$, ОДНОКРАТНО ДОПИРОВАННЫХ АТОМАМИ Ag, Au, Rb, Nd И Er В.В. Срабионян, М.П. Ветчинников, Е.М. Зинина, Е.С. Игнатъева, К.И. Рунина, Д.С. Рубаник, В.А. Дурьманов, И.А. Викленко, И.В. Панков, Е.В. Храмов, А.А. Велигжанин, Л.А. Авакян, Г.Ю. Шахгильдян, В.Н. Сигаев, Л.А. Бугаев | 197 |
| СИНТЕЗ И СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СМЕШАННЫХ ТЕЛЛУРИДОВ МАРГАНЦА, ИНДИЯ И ВИСМУТА Стребко К.С., Фролов А.С., Сергеев А.И. | 198 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ РАСТВОРЕНИЯ НАНОНИТЕЙ И НАНОЧАСТИЦ КРЕМНИЯ РАЗЛИЧНЫХ МОРФОЛОГИЙ В БУФЕРНЫХ РАСТВОРАХ ПРИ РАЗНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ PH Сумарокова М.В., Назаровская Д.А., Крюков Р.Н, Гончар К.А., Николичев Д.Е., Осминкина Л.А. | 200 |
| ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СОСТОЯНИЙ РАШБЫ И ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ В СИСТЕМАХ $Mn_{1-x}Sn_xVl_2Te_4$ Тарасов А.В., Фролов А.С., Ерыженков А.В., Шикин А.М. | 202 |
| ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И ПРИРОДЫ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ В NOO_2 Тетерин Ю.А. (мл.), Рыжков М.В., Путков А.Е., Маслаков К.И., Тетерин А.Ю., Иванов К.Е., Калмыков С.Н., Петров В.Г. | 204 |
| МИКРОСТРУКТУРНЫЕ И ГИДРОФИЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ОБРАЗЦОВ ПОЛИМЕРА ПОЛИЛАКТИДА С РАЗЛИЧНЫМИ РИСУНКАМИ 3D-ПЕЧАТИ Фролова В.Е., Леньшин А.С., Домашевская Э.П., Руднева И.Г., Черненко С.С., Канныкин С.В. | 206 |
| ПРОБЛЕМА АНАЛИЗА ПЕРЕКРЫВАЮЩИХСЯ EXAFS СПЕКТРОВ НА ПРИМЕРЕ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА Хаметова Э.Ф., Бакиева О.Р., Немцова О.М. | 208 |

ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗОГРЕВА СУСПЕНЗИЙ КОМПОЗИТНЫХ
НАНОЧАСТИЦ КРЕМНИЙ-ЗОЛОТО ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ
ЛАЗЕРНОГО ОБЛУЧЕНИЯ

Б.Р.Хамитов, Л.А.Осминкина209

ВЛИЯНИЕ ДОЛИ НИОБИЯ НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И
ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЁНОК Nb-Si, ПОЛУЧЕННЫХ
МАГНЕТРОННЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ

Хыдырова С.Ю., Барков К.А., Терехов В.А., Моисеев К.М., Ивков С.А.,
Керсновский Е.С., Польшин И.В., Новолокина Н.В., Коржова Т.А.211

НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛАЗМОННЫХ
НАНОЧАСТИЦ РАЗНОЙ ГЕОМЕТРИИ В ПОЛЕ 10
НАНОСЕКУНДНЫХ ИМПУЛЬСОВ ВТОРОЙ ГАРМОНИКИ YAG:ND³⁺
ЛАЗЕРА (532 НМ)

Чевычелова Т.А., Звягин А.И., Смирнов М.С., Овчинников О.В.....212

НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛ КРАСИТЕЛЕЙ
МЕТИЛЕНОВОГО ГОЛУБОГО И ИНДОЦИАНИНА ЗЕЛЕНОВОГО В
ПРИСУТСТВИИ ПЛАЗМОННЫХ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА

Чевычелова Т.А., Звягин А.И., Кондратенко Т.С., Смирнов М.С.,
Овчинников О.В.215

ОЦЕНКА ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ СПЕЦИФИЧНОСТИ
АЗОЛОТТРИАЗИНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ К БИОМАКРОМОЛЕКУЛАМ

Черных Ю.А., Плешкова М.Н., Вандышев Д.Ю. Антипов С.С.218

ВОЛЬТ-АМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТОНКИХ ПЛЁНОК КТ
PbS В ПРИСУТСТВИИ ЙОДИДА КАЛИЯ ДЛЯ ФОТОДЕТЕКТОРОВ

Чирков К.С., Смирнов М.С., Овчинников О.В., Гревцева И.Г.....219

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МАССОВОЙ ПЛОТНОСТИ ИОННО-
МОДИФИЦИРОВАННЫХ ТОНКИХ ПЛЕНОК МЕТОДОМ РФЭС

Чукавин А.И., Картапова Т.С., Гильмутдинов Ф.З.221

НАНОМАТЕРИАЛЫ ДЛЯ МЕТАЛЛОКСИДНЫХ ГАЗОВЫХ
СЕНСОРОВ

Шапошник А.В, Звягин А. А, Арефьева О.А., Рябцев С.В223

АТОМНОЕ СТРОЕНИЕ СМЕШАННО-ЛИГАНДНЫХ КОМПЛЕКСОВ
НИКЕЛЯ(II) НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОИЛГИДРАЗОНА 2-
(N-ТОЗИЛАМИНБЕНЗАЛЬДЕГИДА) И 1-АЛКИЛ-
2-АМИНОБЕНЗИМИДАЗОЛОВ

А.А. Ширяева, В.Г. Власенко, Б.В. Чальцев, А.С. Бурлов, Ю.В. Кошкинко,
В.А. Лазаренко.....224

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ РЕЗИСТИВНЫХ ПОКРЫТИЙ ТВЕРДОГО
РАСТВОРА-В СИСТЕМЕ CU-N НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Шманай Е.Е., Зур И.А.227

| | |
|---|-----|
| МЕЖФАЗНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В МЕО _x /MWNT _s (ME – CU, NI) ПО ДАННЫМ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ XANES СПЕКТРОВ | |
| Шматко В.А., Ершов И.В., Дмитриев В.О., Яловега Г.Э. | 230 |
| РАСШИФРОВКА ФОТОЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЫ МОНОКРИСТАЛЛА ГЕРМАНИЯ И ЕГО ОКСИДА С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЁТОВ | |
| Шрамков Е.А., Андреев А.А., Чумаков Р.Г., Станкевич В.Г., Суханов Л.П. | 231 |
| ПРИМЕНЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ МУРР ДЛЯ ВЫЯВЛЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ ДНК-АПТАМЕРОВ | |
| Щугорева И.А., Артюшенко П.В., Морячков Р.В., Заблуда В.Н., Томилин Ф.Н., Кичкайло А.С. | 233 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РАСТРОВОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ ФОТОРЕЗИСТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ТЕХНОЛОГИИ ФОРМИРОВАНИЯ СВЧ КОПЛАНАРНЫХ ЛИНИЙ | |
| Юртова Е.И., Бобров А.И., Николичев Д.Е. | 235 |
| ИНТЕГРАЦИЯ БЕЛКА DPS С МАССИВОМ НАНОНИТЕЙ КРЕМНИЯ ПО ДАННЫМ МИКРОСКОПИЧЕСКИХ И РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ | |
| Паринова Е.В., Беликов Е.А., Сиваков В., Чумаков Р.Г., Лебедев А.М., Какулия Ю.С., Чувенкова О.А., Антипов С.С., Турищев С.Ю. | 238 |
| ИЗУЧЕНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ ТОКОВ И ЗАРЯДОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ И ПЛЕНКАХ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭМИССИИ ПРИ ЛАЗЕРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ | |
| Кузнецова Т.В., Гребенников В.И. , Чумаков Р.Г. | 240 |

АНАЛИЗ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ МЕТОДОМ EXELFS-СПЕКТРОСКОПИИ

Бакиева О.Р.

*Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН
e-mail: ftiran@mail.ru, тел.: 8 (341) 2430163*

Спектроскопия эмиссии электронов при возбуждении твердых тел электронным пучком или рентгеновским излучением является основным методом исследования химического состава и электронной структуры поверхностных слоев образцов.

Протяженные тонкие структуры спектров энергетических потерь электронов (EXELFS –Electron Energy Loss Fine Structure) представляют собой слабоинтенсивные (1/5–1/10 от интенсивности потери на соответствующем краю) осцилляции, расположенные в низкоэнергетической части спектра вблизи краев поглощения внутренними уровнями атомов образца. Период этих осцилляций порядка 10 эВ, а протяженность до 500 эВ. Впервые эти структуры привлекли внимание исследователей в 1974 г. (J.J. Ritsko с коллегами) [1]. По своей природе EXELFS-спектры относятся к классу XAFS-подобных явлений (X-ray Absorption Fine Structure), поскольку формируются в результате когерентного рассеяния вторичного электрона на локальном атомном окружении возбуждаемого атома [2]. Следовательно, так же как и XAFS, EXELFS-спектры содержат информацию о локальной атомной структуре – о парциальных координационных числах, длинах химических связей и параметрах их дисперсии.

В настоящей работе рассматривается возможность исследования локальной атомной структуры поверхности вещества методом анализа протяженных тонких структур спектров энергетических потерь электронов. Показаны преимущества метода, ограничения и рассмотрены перспективы развития.

Исследование выполнено при поддержке Минобрнауки России (договор № 075-15-2021-1351) в части развития методологии рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и спектроскопии рентгеновского поглощения.

1. Ritsko J.J., Gibbons P.C., Schnattery S.E. Phys. Rev. Lett. 1974. V. 32. P. 671.
2. Бакиева О. Р., Немцова О. М., Сурнин Д. В. Пов. Рен.,син. и нейт.ис. 10, 2015, С. 53.

ЭФФЕКТЫ АДсорбЦИОННО-ИНДУЦИРОВАННОЙ СЕГРЕГАЦИИ КАК ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Бухтияров А.В.^{1,2}, Стахеев А.Ю.³, Бухтияров В.И.²

¹ ЦКП «СКИФ» ИК СО РАН, Научоград Кольцово, Россия

² ИК СО РАН, Новосибирск, Россия

³ ИОХ РАН, Москва, Россия

e-mail: avb@catalysis.ru, тел.: 8 (383) 3269774

Биметаллические наносистемы привлекают широкое внимание исследователей, в первую очередь, в области гетерогенного катализа. Это обусловлено тем, что такие системы во многих случаях проявляют более высокую каталитическую активность, селективность и стабильность по сравнению с монометаллическими аналогами в целом ряде важных промышленных химических процессов, таких, например, как синтез винилацетата, низкотемпературное окисление CO, каталитическое восстановление NO, прямой синтез пероксида водорода, селективное гидрирование ацетилен (фенилацетилен) в этилен (стирол) и многие другие. Таким образом, введение в состав катализатора второго металлического компонента, наравне с размерным эффектом (подразумевающим варьирование размера нанесённых частиц металла в интервале 1-50 нм) и эффектами, связанными с взаимодействием активного компонента с носителем, является одним из основных и наиболее эффективных методов управления каталитическими характеристиками таких нанесённых систем. Несмотря на большое число исследований, посвящённых изучению синергетических эффектов, возникающих при использовании биметаллических катализаторов, характер взаимного влияния компонентов, может существенно отличаться для различных каталитических систем и, как следствие, с трудом поддаётся обобщению. Тем не менее, большинство исследователей сходятся во мнении, что именно изучение состава поверхности образца является ключом к пониманию роли второго компонента в биметаллических катализаторах, так как соотношение компонентов на поверхности сплава может существенно отличаться от объёмного состава наночастиц. Это связано с тем, что химический состав и структура активных центров биметаллических систем определяются не только соотношением металлов, задаваемым на стадии синтеза катализатора. Структура поверхности может существенно изменяться как под воздействием реакционной среды, т.е. непосредственно в ходе протекания каталитической реакции, так и при проведении определенных предварительных обработок катализаторов в различных газовых средах. Необходимо отметить, что сегрегационные эффекты, связанные с обогащением поверхности наночастиц при адсорбции и в условиях проведения каталитического процесса, привлекают все большее внимание исследователей, работающих в этой области. Так, например, в работе Норскова (Norskov) и соавторов [1] и обзоре Зафеиратоса (Zafeiratos) и соавторов [2] детально проанализированы факторы, определяющие состав поверхности биметаллических катализаторов в процессе адсорбции различных газов. Было также продемонстрировано [3], что

адсорбционно-индуцированная сегрегация может существенным образом изменять состав поверхности наночастиц, обладающих структурой «ядро-оболочка». Несмотря на то, что в литературе имеется значительное количество работ посвященных исследованию сегрегационных эффектов, тем не менее, целенаправленному их использованию для «тонкой настройки» состава и морфологии поверхности и, соответственно, формированию различных типов активных центров в биметаллических катализаторах уделяется недостаточно внимания. Тем не менее, данный метод имеет большой потенциал для практического применения. В частности, явление адсорбционно-индуцированной сегрегации может быть использовано для управления составом внешней поверхности биметаллических частиц на основе Pd для оптимизации каталитических свойств катализаторов селективного гидрирования. Такая возможность была продемонстрирована, например, в работах британских исследователей, которые экспериментально установили, что селективность и активность катализаторов селективного гидрирования тройной C≡C связи в двойную может «настраиваться» в результате направленной адсорбции [4, 5].

Таким образом, для выяснения причин проявления синергетических эффектов в биметаллических катализаторах, очевидна необходимость проведения детального систематического исследования каталитических свойств (активность и/или селективность) при добавлении второго компонента в монометаллические катализаторы в зависимости от структуры и химического состава поверхности. Кроме того, детальное исследование эффектов, связанных с сегрегацией одного из компонентов сплава под воздействием газовых или реакционных сред, современными физико-химическими методами, что в конечном итоге позволит разработать и развить методологию управления структурой активных центров биметаллического катализатора на атомарном уровне.

В результате выполнения работы были установлены корреляций между каталитическими свойствами и химическим состоянием/структурой активного компонента на поверхности биметаллических катализаторов. Кроме того исследование сегрегационных эффектов под воздействием газовых или реакционных сред и разработки рекомендаций к «тонкой настройке» поверхности в «реальных» биметаллических катализаторах для достижения максимальной активности, стабильности, селективности в реакциях селективного гидрирования C≡C связи. Исходя из полученных результатов, предложен подход, позволяющий сформулировать рекомендации для улучшения каталитических характеристик (активность/селективность/стабильность) биметаллических катализаторов за счёт «тонкой» настройки структуры поверхности и целенаправленного создания центров нужного типа, в результате использования эффектов адсорбционно индуцированной сегрегации.

1. Christoffersen E., Stoltze P., Norskov J.K., Surf. Sci., 2002, 505, 200.
2. Zafeiratos S., Piccinin S., Teschner D., Catal. Sci. Technol., 2012, 2, 1787.
3. Mayrhofer K.J.J., Juhart V., Hartl K., Hanzlik M., Arenz M., Angew. Chem. Int. Ed., 2009, 48, 3529.
4. McCue A.J., Anderson J.A., J. Catal., 2015, 329, 538.
5. McCue A.J., Gibson A., Anderson J.A., Chem. Eng. J., 2016, 285, 384.

СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЕВЫХ НАНОСТРУКТУР ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ВИРУСОВ И БАКТЕРИЙ

Гончар К.А.

*«МГУ имени М.В. Ломоносова», г. Москва, Россия
e-mail: k.a.gonchar@gmail.com, тел.: 8 (915) 0913917*

Среди материалов, используемых в качестве биочувствительных подложек, в последние годы большое внимание и популярность приобрел пористый кремний (ПК), активные исследования которого ведутся с 1990-х годов, а также кремниевые нанонити (КНН), которые начали активно исследоваться с 2000-х годов и которые являются продолжением развития ПК. Их привлекательные и настраиваемые характеристики, такие как простота изготовления, особые оптико-физические свойства, адаптированная морфологическая структура и универсальный химический состав поверхности, расширяют их перспективы в качестве преобразователей для изготовления биосенсоров. Кроме того, ПК и КНН привлекают внимание исследователей в области биосенсорики не только за счёт своих оптоэлектронных свойств, но и за счёт их биосовместимости и биodeградируемости. Сенсоры, основанные на пористых кремниевых наноструктурах очень эффективны за счёт большой удельной поверхности, а также за счёт того, что размер пор можно регулировать путем подбора параметров, используемых в синтезе образцов, в соответствии с размерами объектов-мишеней.

Было продемонстрировано неспецифическое связывание вирусов с поверхностью наноструктур из массивов КНН и показана возможность использования этого эффекта для изготовления неспецифического оптического [1] и импеданс-сенсора [2] для диагностики вирусов. Кроме того, было продемонстрировано неспецифическое связывание бактерий с поверхностью различных кремниевых наноструктур таких как ПК и КНН. С помощью спектра гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) на КНН, декорированных серебром, был успешно обнаружен интерналин В, белок, связанный с патогенными бактериями *Listeria monocytogenes* [3]. Также получилось обнаружить бактерии *Listeria innocua* с помощью ГКР на КНН, покрытых снизу золотыми наночастицами, а сверху серебряными и золотыми наночастицами [4].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-10062, <https://rscf.ru/project/22-72-10062/>.

1. Gonchar K.A., Agafilushkina S.N., Moiseev D.V., Bozhev I.V., Manykin A.A., Kropotkina E.A., Gambaryan A.S., Osminkina L.A., Mater. Res. Express, 2020, 7, 035002.

2. Gongalsky M.B., Tsurikova U.A., Samsonova J.V., Gvindzhiliiia G.Z., Gonchar K.A., Saushkin N.Yu., Kudryavtseva A.A., Kropotkina E.A., Gambaryan A.S., Osminkina L.A., Res. in Mat., 2020, 6, 100084.

3. Гончар К.А., Алексеева Е.А., Гюппенен О.Д., Божьев И.В., Калинин Е.В., Ермолаева С.А., Осминкина Л.А., Оптика и спектроскопия, 2022, 130(11), 1749-1754.

4. Nazarovskaia D.A., Domnin P.A., Gyuppenen O.D., Tsiniiaikin I.I., Ermolaeva S.A., Gonchar K.A., Osminkina L.A., Bull. Russ. Acad. Sci. Phys., 2023, 87(Suppl. 1) S41–S46.

РЕНТГЕНОВСКИЕ СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ XANES В НАНОКОМПОЗИТАХ ПЕРЕМЕННОГО СОСТАВА (CoFeZr)_x(MgF₂)_{100-x} С НЕЛИНЕЙНЫМИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМИ СВОЙСТВАМИ

Э.П. Домашевская¹, А.С. Ивков¹, А.А. Гуда², Л.В. Гуда², А.В. Ситников³

¹Воронежский Государственный Университет 1, Воронеж, Россия

²Южный Федеральный Университет 2, Ростов-на Дону, Россия

³Воронежский Государственный Технический Университет 3, Воронеж,
Россия

e-mail: fit@phys.vsu.ru, тел.: 8 (473) 2208363

Целью комплексных исследований нанокompозитов (НК) является установление влияния переменного атомного состава и структурно-фазового состояния НК (CoFeZr)_x(MgF₂)_{100-x} на их нелинейные электромагнитные/магнитооптические свойства и рентгеновские спектры поглощения XANES. Исследования НК, полученных ионно-лучевым распылением составной мишени в атмосфере аргона в широком диапазоне составов $x=9-51$ ат.%, методами XRD, XPS и IR спектроскопии показали, что относительное содержание металлического сплава CoFeZr в нанокompозитах наиболее существенным образом влияет на атомную структуру, фазовый состав и определяет их нелинейные электронные, магнитные и магнитооптические свойства [1-3].

Значение порога резистивной перколяции $x_{\text{per}}=34$ ат.%, определенное из концентрационных зависимостей электросопротивления НК, совпадает с началом зарождения металлических нанокристаллов CoFeZr в диэлектрической матрице MgF₂. Абсолютное значение максимального тунельного магнитосопротивления НК составляет 2,4 % в магнитном поле 5,5 кЭ при $x=25$ ат.%, до порога перколяции [2].

На концентрационных зависимостях магнитооптического поперечного эффекта Керра [3] появляются два максимума, один из которых при $x = 34$ ат.% соответствует образованию нанокристаллов сплава CoFeZr гексагональной структуры в аморфной матрице MgF₂, а второй максимум при $x = 45$ ат.% соответствует фазовому переходу нанокристаллов из гексагональной в объемно-центрированную кубическую структуру ОЦК.

Порог магнитной перколяции в НК при $x_{\text{fm}} = 34$ ат.% соответствует появлению петли гистерезиса с коэрцитивной силой $H_c \approx 8$ Э и совпадает с порогом резистивной перколяции $x_{\text{per}} = 34$ ат.% [3].

Концентрационная зависимость коэрцитивной силы $H_c(x)$ показала, что при меньших содержаниях металлического сплава ($x < 30$ ат.%) НК являются суперпарамагнитными материалами ($H_c=0$). С увеличением содержания сплава в области порогов магнитной и резистивной перколяции НК начинают проявлять ферромагнитный магнитомягкий характер и не изменяют его далеко за порогами перколяции с максимальным значением коэрцитивной силы $H_c \leq 30$ Э [3].

Рентгеновские спектры поглощения XANES в области главных K-краев поглощения кобальта Co K-edge и железа Fe K-edge (Рис.1) были получены на лабораторном спектрометре Rigaku R-XAS (Рис.2) в ЮФУ (Ростов-на-Дону).

Положение К-краев спектров поглощения нанокompозитов при сравнении с эталонными образцами металлической фольги обоих металлов указывает на металлическую природу нанокристаллов сплава во всей серии образцов.

При этом тонкая структура спектров поглощения для двух металлов за главными К-краями поглощения кобальта и железа подобна, что говорит об одинаковом локальном окружении атомов вокруг Co и Fe в сплаве CoFeZr. Тонкая структура спектров XANES определяется относительным содержанием сплава в НК, а следовательно, размерами нанокристаллов, и изменяется за порогом перколяции, при фазовом переходе из ГПУ ($x=20; 25; 30$) в ОЦК структуру ($x=45; 50$). При этом наиболее бесструктурными, но по-прежнему подобными для двух металлов, оказываются XANES К-спектры Co и Fe в напыленной пленке чистого сплава CoFeZr ($x=100$), что обусловлено его аморфным состоянием.

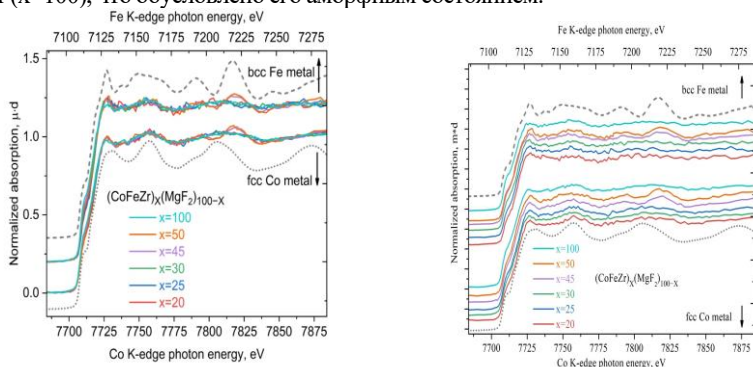


Рис. 1. Рентгеновские спектры поглощения XANES в нанокompозитах с выровненным положением краев поглощения Fe K-edge и Co K-edge. Пунктирные кривые принадлежат эталонным спектрам металлической фольги железа bcc Fe metal и кобальта fcc Co metal.

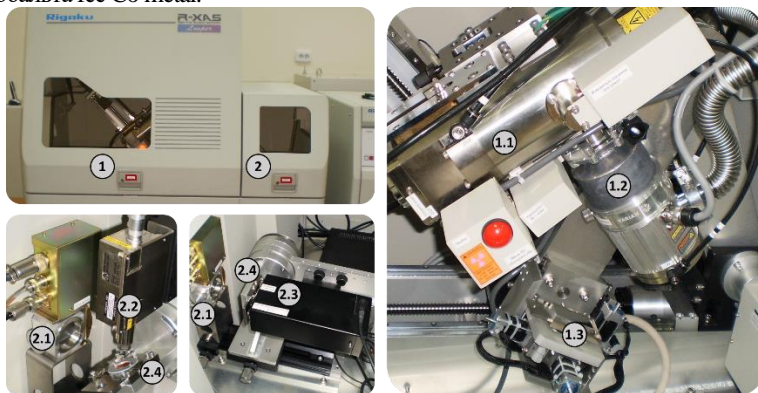


Рис. 2. Лабораторный рентгеновский абсорбционный спектрометр Rigaku R-XAS

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках Госзадания (проект № ФЗГУ-2023-006) и Соглашения N 075-15-2021-1351 в части XRD и XANES исследований.

1. Domashevskaya E.P., Ivkov S.A., Sitnikov A.V. et al., Journal of Alloys and Compounds, 2021, 870,159398.

2. Domashevskaya E.P., Ivkov S.A., Seredin P.V., Goloshchapov D.L., Barkov K.A., Ryabtsev S.V., Segal Y.G., Sitnikov A.V., Ganshina E.A., Magnetochemistry, 2023(6),160.

3. Ganshina E.A., Ivkov S.A., Domashevskaya E.P. et al., Nanomaterials, 2021, 11, 1666.

ИСТОЧНИК СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ЦКП "СКИФ" : ПРОГРЕСС С РЕАЛИЗАЦИЕЙ ПРОЕКТА

Зубавичус Я.В., Бухтияров А.В.

¹ ЦКП «СКИФ», *Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН,
Кольцово, Россия*
e-mail: ya.v.zubavichus@srf-skif.ru, тел.: 8 (913) 2014144

Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН выступает в роли застройщика (заказчика) в создании источника синхротронного излучения поколения 4+ ЦКП «СКИФ». Основное строительство должно быть завершено к декабрю 2024 года, а в середине-второй половине 2025 года планируется запуск объекта в режиме опытной эксплуатации (Рис. 1).

В докладе описаны текущий статус реализации проекта, основные направления научной программы ЦКП «СКИФ», базовый функционал шести экспериментальных станций первой очереди, предполагаемые схемы взаимодействия с научно-образовательными организациями и предприятиями реального сектора экономики по проведению технологически-ориентированных исследований. Представлена концепция программы инфраструктурного развития и создания экспериментальных станций второй очереди



Рисунок 1. Вид на строительную площадку ЦКП «СКИФ» (конец августа 2024 года): 1 – здание инжектора, 2 – здание основного накопителя, 3 – отдельное здание экспериментальной станции «Быстропротекающие процессы», 4 - отдельное здание экспериментальной станции «Диагностика в высокоэнергетическом рентгеновском диапазоне», 5 – корпус стендов и испытаний, 6 – корпус инженерного обеспечения, 7 – лабораторный корпус.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки высшего образования РФ в рамках Государственного задания ЦКП «СКИФ».

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ЗАРЯДОВ ИОНОВ An В AnO₂ (An = Th – Lr)

Тетерин Ю.А.^{1,2}, Путков А.Е.², Рыжков М.В.³, Тетерин А.Ю.², Иванов К.Е.²,
Калмыков С.Н.¹, Петров В.Г.¹

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Москва, Россия

²НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

³Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: Teterin_YA@nrcki.ru, тел.: 8 (499) 1969252

Релятивистским методом дискретного варьирования (РДВ) рассчитан состав молекулярных орбиталей (МО) для AnO₂ (An = Th – Lr), построены схемы МО и рассчитаны интенсивности линий в рентгеновских фотоэлектронных спектрах (РФЭС) этих диоксидов (в диапазоне энергий связи от 0 до ~50 эВ). С учетом состава МО были определены валентные электронные конфигурации и заряды (в приближении по Малликену) ионов An в AnO₂ (An = Th – Lr).

Найдено, что эффективные заряды ионов An во всех AnO₂ (An = Th – Lr) меньше +4, принимаемого в ионном приближении (рис. 1). Такие заряды находятся в согласии с данными для других соединений актиноидов [1,2], а также величинами химических сдвигов An 4f-электронов в спектрах РФЭС AnO₂ по сравнению с металлами. Так, для Np 4f_{7/2}-электронов при переходе от металлического Np к NpO₂ наблюдается сдвиг равный ΔE_b = 2.6 эВ [3]. Если бы эффективный заряд Np был равен +4 e, то это приводило бы к сдвигу в десятки эВ. Так, возникновение вакансии на квазиостовном уровне в CeO₂ приводит к сдвигу линий, например, Ce 3d-электронов на ~16.0 эВ [4].

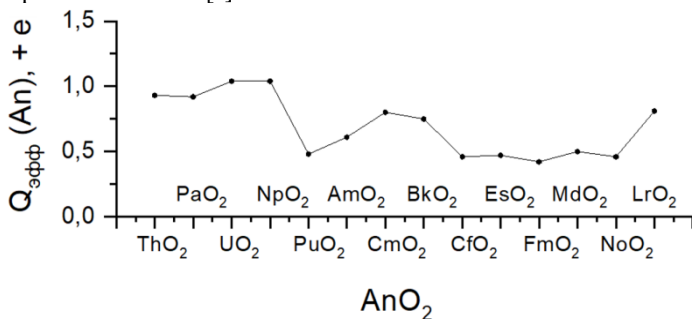


Рис. 1. Эффективные заряды ионов An в AnO₂ (An = Th – Lr).

Полученные теоретические и экспериментальные данные свидетельствуют о существенном вкладе ковалентной составляющей в химическую связь в AnO₂ (An = Th – Lr). В частности, наблюдается перекрытие не только An 6d АО, но и An 6p и An 5f АО с АО кислорода. Это приводит к образованию внешних валентных (ВМО) и внутренних валентных молекулярных орбиталей (ВВМО) в AnO₂ (An = Th – Lr).

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» и государственного задания Института химии твердого тела УрО РАН (тема №_124020600024-5).

1. Kelly P.J., Brooks M.S.S., Allen R., Journal de Physique Colloques, 1979, 40, C4-184 – C4-186.

2. Gubanov V.A., Rosén A., Ellis D.E., Journal of Physics and Chemistry of Solids, 1979, 40(1), 17 – 28.

3. Teterin Yu.A., Teterin A.Yu., Ivanov K.E., Ryzhkov M.V., Maslakov K.I., Kalmykov S.N., Petrov V.G., Enina D.A., Physical Review B, 2014, 89, 035102.

4. Maslakov K.I., Teterin Yu.A., Ryzhkov M.V., Popel A.J., Teterin A.Yu., Ivanov K.E., Kalmykov S.N., Petrov V.G., Petrov P.K., Farnan I., Physical Chemistry Chemical Physics, 2018, 23, 16167 – 16175.

РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВИСМУСОДЕРЖАЩИХ НИОБАТОВ И ТАНТАЛАТОВ, ДОПИРОВАННЫХ АТОМАМИ 3d-МЕТАЛЛОВ

Некипелов С.В.^{1,2}, Жук Н.А.², Петрова О.В.¹, Бакина К.А.¹, Скандаков Р.Н.¹,
Рудковский В.О.^{1,2}, Лебедев А.М.³, Чумаков Р.Г.³, Сивков В.Н.¹

¹«ФИЦ Коми НЦ УрО РАН», г. Сыктывкар, Россия

²«Сыктывкарский государственный университет им. Питирима
Сорокина», г. Сыктывкар, Россия

³НИИ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия
e-mail: NekipelovSV@mail.ru, тел.: 8 (8212) 391451

Пирохлоры являются важным классом материалов в различных технологических применениях благодаря широкому спектру практически полезных свойств, среди которых отмечают металлическую и ионную проводимость, сверхпроводниковые и сегнетоэлектрические свойства. Благодаря отличным диэлектрическим свойствам, возможности регуляции диэлектрических свойств электрическим полем, низкой температуре спекания оксидные пирохлоры перспективны в качестве диэлектриков для многослойных керамических конденсаторов, перестраиваемых микроволновых диэлектрических компонентов, резонаторов, устройств для СВЧ приложений.

В кристаллической структуре пирохлора различают две катионные подрешетки со структурой антикристобалита A_2O^{\cdot} и октаэдрическую B_2O_6 . Позиции катионов А с октакислородной координацией занимают крупные ионы (Ca^{2+} , Bi^{3+}). Трехмерный каркас B_2O_6 образован соединенными по вершине угла октаэдрами $[BO_6]$, в позициях которых располагаются катионы меньшего ионного радиуса (Ti^{3+} , Ta^{5+} , Sb^{5+}). При этом соединения висмута с эквимольным количеством ионов висмута и тантала (ниобия, сурьмы) не образует структуру пирохлора и кристаллизуется в виде $BiTaO_4$, а аналогичные титанаты висмута имеют структуру пирохлора только до температуры $640^{\circ}C$. Дополнительное допирование атомами, в частности 3d-металлов, приводит с одной стороны к образованию однофазных пирохлоров висмута вплоть до температуры $1200^{\circ}C$, а с другой стороны к существенному изменению вышеперечисленных свойств. При этом данное допирование приводит к частичной вакансии подрешетки висмута A_2O^{\cdot} и распределению легирующих примесей как в катионных подрешетках висмута, так и, преимущественно, октаэдрическую B_2O_6 , вызывая релаксационные процессы в керамике.

В представленной работе показаны результаты исследования методами NEXAFS- и XPS-спектроскопии электронного состояния и характера межатомных взаимодействий атомов 3d-металлов в ниобагах и танталатах висмута со структурой пирохлора. Многоэлементные твердые растворы пирохлоров, допированных атомами 3d-металлов $Bi_2X_{1/2}Y_{1/2}(Ta/Nb)_2O_9$ и $Bi_2X_{1/3}Y_{1/3}Z_{1/3}(Ta/Nb)_2O_9$ (X, Y, Z=M(3d)), были синтезированы твердофазным методом при температурах до $1100^{\circ}C$. Все образцы были исследованы методами рентгеноабсорбционной (NEXAFS) спектроскопии с использованием синхротронного излучения на станции НаноФЭС Курчатовского центра синхротронного излучения и рентгеноэлектронной (XPS)

спектроскопии в ресурсном центре «Физические методы исследования поверхности» Научного парка Санкт-Петербургского университета.

На основании спектральных исследований было определено зарядовое состояние как атомов висмута, тантала и ниобия, так и атомов допантов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351.

МЕТРОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ИЗМЕРЕНИЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПРИБОРНЫХ КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР

Николичев Д.Е., Бобров А.И., Нежданов А.В., Убийвовк Е.В., Трушин В.Н., Сидоренко К.В., Хазанова С.В., Малехонова Н.В., Юртова Е.И.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
e-mail: nikolitchev@phys.unn.ru, тел.: 8 (905) 669-06-28*

Создание новой электронной компонентной базы требует специализированного подхода к организации контрольных измерений на всех этапах разработки и производства. Это относится в равной степени к проектированию материалов, измерению физических параметров приборных структур на различных стадиях их формирования, а также к определению характеристик конечных устройств.

Критическим для электронной промышленности является построение физических моделей приборов, которые позволяют существенно сократить затраты при производстве, увеличить выход годной продукции, а также повысить её функциональные характеристики. Особенно актуальным это становится при переходе к наномасштабным системам, проявляющим квантоворазмерные эффекты.

Создание приборных структур с наноразмерными активными элементами – сложный, многоступенчатый процесс. Риск выбраковки конечных изделий можно существенно уменьшить при сведении в единую систему проектирования физических моделей, физико-химических свойств материалов, топологических схем и характеристик приборов.

Как показывает опыт исследования наноструктур, для достоверного контроля их свойств требуется применение комплекса диагностических методов с перекрёстным сопоставлением результатов. Так, например, получения общей картины об электронных и оптических свойствах квантоворазмерных систем необходимо знать их геометрию, состав и структуру. Проведение этих исследований возможно с использованием метода аналитической просвечивающей электронной микроскопии (АПЭМ) с высоким разрешением на поперечном срезе.

АПЭМ кроме базовой возможности анализа структуры электронно-дифракционным методом, позволяет провести диагностику состава материалов с использованием рентгеновской энергодисперсионной спектроскопии и спектроскопии характеристических потерь энергий электронами. Дополнительно методом геометрической фазы [1] оказывается возможным найти распределение полей упругих деформаций в кристаллических наносистемах. В совокупности перечисленные инструменты позволяют получить исчерпывающую информацию об исследуемом объекте. Таким образом, можно говорить о формировании комплексной методики анализа наноструктурированных систем.

Методика была апробирована при проведении диагностики структур с вертикально-связанными наноструктурами $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ в матрице кремния, сформированных методом молекулярно-пучковой эпитаксии [2]. Аналогичные работы проведены в рамках построения моделей светоизлучающих систем с

туннельно-связанными квантовыми ямами $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в матрице GaAs, созданных методом МОС-гидридной эпитаксии [3]. Общность подхода обусловлена единством контролируемых параметров указанных гетероэпитаксиальных структур.

Интерес к структурам с массивами наностроек GeSi связан с возможностью создания на их основе элементов кремниевой нанопотоники [4]. Структуры на основе $\text{A}^{\text{III}}\text{B}^{\text{V}}$ являются объектом исследования как безальтернативные излучатели и детекторы, применяемые для широкого спектра решаемых в полупроводниковой электронике и фотонике задач [5]. Актуальность и большое количество исследований, посвященных этим системам, делают их идеальным объектом для разработки методических подходов по созданию достоверных математических моделей.

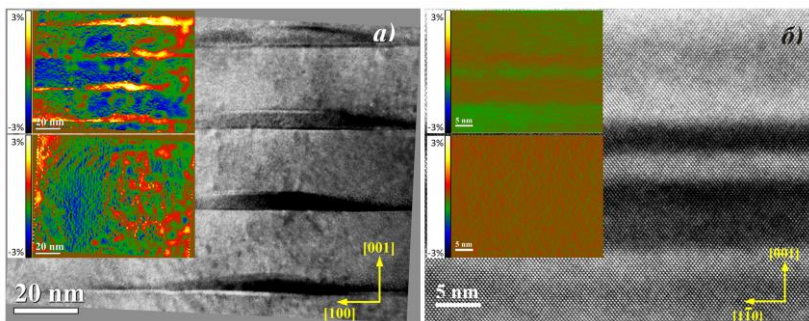


Рис. 1. ПЭМ высокого разрешения на поперечном срезе структур с вертикально связанными наностройками GeSi в кремнии (а) и с туннельно-связанными квантовыми ямами $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ в арсениде галлия (б). На вставках приведены поля упругих деформаций: сверху – в направлении роста, снизу – в плоскости роста [2, 3].

Для точного решения структуры кванторазмерных систем необходимо предварительно произвести калибровку АПЭМ по кристаллической решетке известного материала, а также определить состав исследуемых объектов с калибровкой по контрольному слою. При этом важной частью работы является выявление и систематизация ошибок измерений, вызванных искажением структуры и состава в процессе пробоподготовки и при проведении измерений. Идеальным вариантом проведения подобного исследования является измерение всех необходимых физических параметров объекта в едином эксперименте с калибровочной мерой.

Основной проблемой диагностики в АПЭМ является малость объема, формирующего аналитический сигнал, низкий уровень которого определяет возрастающую погрешности измерений. Выход из этой ситуации видится в предварительной аттестации дополнительных калибровочных слоёв, заложенных в образец на этапе формирования. При этом создаются условия для применения в качестве контрольных методов электронной спектроскопии, рентгеновской дифракции, вторично-ионной масс-спектропии и др. Указанный подход

сохраняет необходимость создания образцов-спутников, пригодных для контроля прецизионности.

В рамках исследований $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ и $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ квантоворазмерных систем выявлены закономерности между геометрией, структурой, распределением состава и упругих напряжений нанообъектов, что позволило повысить прогностическую ценность математических моделей. Доказательством точности построенной модели служит согласованность расчетного и экспериментального спектра фотолюминесценции квантоворазмерных структур. Тем самым созданы предпосылки для формирования методики аналитической метрологии наноматериалов и наносистем.

В заключении следует отметить, что применение методов диагностики, сопровождающееся поиском источников ошибок и способов их устранения в рамках метрологического контроля, обеспечивает достоверность математических моделей квантоворазмерных систем.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № FSWR-2022-0007.

1. M.J. Nijtch, E. Snoeck, R. Kilaas, Ultramicroscopy, 1998, 74, 131
2. D.A. Pavlov et al, Appl. Phys. Lett., 2014, 105, 161910
3. S.V. Khazanova et al, Optical Mat., 2024, 155, 115825
4. J. Frigerio et al, Sci. Rep., 2015, 5, 15398
5. N.K. Dutta et al, Appl. Phys. Lett., 1997, 70, 1219

КРЕМНИЕВЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ С ЗОЛОТЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ: УСИЛЕНИЕ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЙНИЯ ДЛЯ АНАЛИЗА КЛЕТОК

Осминкина Л.А.^{1,2}

¹*Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия*

³*Институт биологического приборостроения РАН, Пущино, Россия
e-mail: osminkina@physics.msu.ru*

Современные биохимические исследования предъявляют все более высокие требования к точности и чувствительности методов анализа молекулярного состава клеток человека. Одним из перспективных подходов в этом направлении является использование для анализа метода спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния света (ГКР, SERS). Этот метод сочетает в себе высокую чувствительность к молекулам и возможность локализации на уровне одной клетки, что делает его мощным инструментом для исследований в области биохимии человека.

Разработка кремниевых наноматериалов для биосенсорики представляет собой многообещающее и быстроразвивающееся направление [1-4]. Одним из основных преимуществ наноструктур на основе кремния является высокая биосовместимость, что позволяет использовать их в качестве безопасного диагностического инструмента.

В представленном исследовании основное внимание уделено разработке композитных материалов - кремниевых пористых пленок и микроигл, декорированных наночастицами золота, для изучения биологических процессов на молекулярном уровне в отдельных клетках с использованием метода ГКР.

Кремниевые микроиглы (SiMNs) изготавливали с использованием метода глубокого реактивного ионного травления (DRIE) на кремниевых подложках (с-Si), наночастицы золота восстанавливали из AuCl₃ на микроиглах для активации их ГКР свойств. В исследовании использовали раковые клетки MDA231. В ходе исследования использовался конфокальный рамановский спектрометр Confotec MR350 с лазером 633 нм и мощностью 0,1 мВт, специальная ячейка для получения сигналов от живых клеток, время накопления сигнала варьировалось от 2 до 10 секунд.

Согласно микрографиям сканирующей электронной микроскопии, полученные микроиглы имеют длину 15 мкм и диаметр 1 мкм. Наночастицы золота покрывают микроиглы по всей их длине, образуя корону из дендритных наноструктур золота сверху. Профиль EDX вдоль кремниевой иглы для образца Au@SiMNs показывает локализацию короны из золота приблизительно в 1 мкм от кончика. Согласно данным микроспектроскопии ГКР, максимальное усиление сигнала наблюдается у клеток на вершущах Au@SiMNs. Теоретические расчеты связывают это явление с локализованным плазмонным резонансом, возникающим в золотых наноструктурах на микроиглах.

Раковые клетки MDA231 показывают хорошую адгезию на Au@SiMNs в течение 12-часового инкубационного периода. Электронные и оптические методы

микроскопии показывают, что микроиглы прокалывают клетки, обеспечивая их надежную иммобилизацию. С помощью оптической микроскопии в отраженном свете сняты видеофильмы "живых изображений" клеток на Au@SiMNs, которые позволяют в реальном времени наблюдать за клетками на протяжении нескольких дней. Показано, что клетки на микроиглах сохраняют жизнеспособность, что подтверждается анализом Live-Dead. Кроме того, клетки, иммобилизованные на микроиглах, остаются практически неподвижными, что позволяет получать спектры ГКР от отдельных клеток и отслеживать изменения этих спектров во времени.

Показано, что полученные спектры ГКР клеток, иммобилизованных на Au@SiMNs, позволяет изучать молекулярный состав клеточных структур на микроуровне. В спектрах наблюдаются характеристические пики, которые соответствуют колебательным и вращательным модам молекул в клетке: пик на частоте около 785 см^{-1} ассоциируется с колебаниями фосфатных групп в ДНК и РНК; пик на частоте около 1003 см^{-1} связан с вибрациями феналанина и тирозина, ароматических аминокислот, присутствующих в белках и других ароматических соединениях клетки; пики около 1260 и 1338 см^{-1} соответствуют вибрациям амидных связей (C-N и C-C вибрации), присутствующих в структуре белков клетки. Эти пики помогают анализировать структуру и конформацию белковых молекул; пики около 1440 см^{-1} связаны с вибрациями метиленовых групп ($-\text{CH}_2$) в липидах, составляющих клеточные мембраны. Они отражают структуру и состояние липидного состава клетки; пик около 1650 см^{-1} соответствует амидной I связи в белках (C=O вибрация), а также может отражать вклад нуклеиновых кислот. Он играет ключевую роль в анализе структуры белков и нуклеиновых кислот в клетке.

Показано, что использование спектроскопии ГКР позволяет не только определять наличие определённых молекул, но и изучать их изменения в ответ на различные биологические процессы или воздействия, для чего ходе исследования Au@SiMNs также использовались для доставки доксорубина в клетки. В этом процессе ГКР-активные микроиглы позволили не только наблюдать усиление сигнала молекул доксорубина в клетках, но и отслеживать изменения в молекулярном составе клеток при воздействии цитостатических молекул.

Полученные в данном исследовании результаты могут стать решающими в разработке инновационных методов для персонализированной медицины, позволяющих выбирать оптимальную диагностическую и терапевтическую стратегию для каждого пациента на основе анализа молекулярного состава и его изменений в клетках с помощью кремниевых микроигл и метода спектроскопии ГКР.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 24-15-00137). Автор также выражает благодарность коллегам Собина И.О., Первушин Н.В., Кудрявцев А.А., Елисеев А.А., Тюрин-Кузьмин П.А. за участие в работе.

1. Kartashova A. D. et al. Surface-enhanced Raman scattering-active gold-decorated silicon nanowire substrates for label-free detection of bilirubin // ACS Biomaterials Science & Engineering. 2021. Т. 8. №. 10. С. 4175-4184.

2. Žukovskaja O. et al. Rapid detection of the bacterial biomarker pyocyanin in artificial sputum using a SERS-active silicon nanowire matrix covered by bimetallic noble metal nanoparticles //Talanta. 2019. T. 202. C. 171-177.

3. Nazarovskaia D. A. et al. Advanced Bacterial Detection with SERS-Active Gold-and Silver-Coated Porous Silicon Nanowires //Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2023. T. 87. №. Suppl 1. C. S41-S46.

4. Waghule, T., Singhvi, G., Dubey, S. K., Pandey, M. M., Gupta, G., Singh, M., & Dua, K. Biomedicine & pharmacotherapy, 2019, 109, 1249.

ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ НАНОКОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ КОМПЛЕМЕНТАРНОГО НАБОРА МЕТОДОВ НА ПРИМЕРЕ MoOC/MWCNT

Сивков В.Н.

*ФИЦ Коми НЦ УрО РАНЮ Сыктывкар, Россия
e-mail: sivkovvn@mail.ru, тел.: 8 (8212) 391451*

Многостенные углеродные нанотрубки (Multi walled carbon nanotrube, MWCNT) являются потенциально полезным конструкционным компонентом гибридных материалов и основой для нанокompозитов из-за их легкой, пористой и очень жесткой структуры, высокотемпературной стойкости и химической инертности. Благодаря уникальным электронным свойствам, химической стабильности и высокой удельной поверхности MWCNT являются идеальным носителем для металлосодержащих катализаторов. Перспективным методом приготовления таких катализаторов является осаждение из паровой фазы металлоорганических соединений (MOCVD). Преимущества метода MOCVD перед другими методами – возможность проведения процесса осаждения покрытий в условиях форвакуума; большой выбор летучих металлоорганических соединений; относительно низкие температуры проведения процесса осаждения покрытий (150 – 5000C); возможность регулирования состава и толщины покрытия в ходе осаждения. Поэтому этот метод был использован для приготовления наноразмерных покрытий из карбидов и оксидов молибдена. В качестве прекурсора для получения молибденсодержащих покрытий был использован гексакарбонил молибдена [Mo(CO)6]. Характеризация химического состава и структура границы раздела MoOC/MУНТ и MoOC-покрытия, проводилась с использованием методов, чувствительных, как к изменению электронных свойств, так и к химическому составу карбидов и оксидов молибдена, а также к типу взаимодействия между поверхностью MWCNT и тонкими слоями MoOC покрытия. Для характеристики образцов MoOC/MWCNT были использованы методы рентгеновской дифрактометрии (XRD), рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS), ближней тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения (NEXAFS) с применением синхротронного излучения, сканирующей электронной микроскопии (SEM) и Рамановской спектроскопии. Применение перечисленных методов исследования и анализ данных для характеристики образцов, содержащих компоненты разных фаз и набор нескольких соединений, а также неоднородные и разные по толщине осажденные покрытия, представляет собой сложную задачу, решение которой требует понимание детальных особенностей и физических приближений, лежащих в основе применяемых экспериментальных методик. В настоящем докладе проводится краткое описание используемых методов и обсуждаются особенности их применения для характеристики нанокompозита MoOC/MWCNT.

Работа выполнена при поддержке «Министерства науки и высшего образования России» в рамках соглашения N 075-15-2021-1351.

ФОТОЭМИССИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ДЛЯ АНАЛИЗА ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И МАГНЕТИЗМА СОЕДИНЕНИЙ ЛАНТАНОИДОВ

Д. Ю. Усачёв²

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

²Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия
e-mail: usachov.d@gmail.com, тел.: 8 (812) 3636000 доб. 9244

Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением (ФЭСУР, ARPES) является наиболее прямым экспериментальным методом изучения электронного строения твердых тел. Измеряя кинетическую энергию и угловое распределение фотоэлектронов, можно получить подробную информацию о зависимости между энергией и импульсом электронов, распространяющихся внутри кристаллического материала. Это имеет большое значение для выяснения связи между электронными, магнитными и химическими свойствами твердых тел. Дополнительно анализируя угловые распределения фотоэлектронов основных уровней, можно получить информацию об атомной структуре с помощью метода дифракции фотоэлектронов [1].

В докладе рассмотрены фотоэмиссионные методы с использованием синхротронного излучения, а также представлены результаты применения фотоэлектронной спектроскопии для изучения электронной структуры, магнетизма и связанных с ними свойств слоистых кристаллов соединений лантаноидов LnT_2X_2 , где Ln — редкоземельный элемент, T — переходный металл, а X = Si или P. Некоторые из этих материалов демонстрируют сильно коррелированное поведение электронов и необычные магнитные свойства. Демонстрируются возможности различных методов фотоэмиссии по выявлению особенностей электронной и спиновой структуры квантовых материалов, включая объемные и поверхностные электронные состояния, эффекты спин-орбитального взаимодействия и электронных корреляций, изменение валентности 4f-элементов, различия в магнитных свойствах поверхностных атомных слоев относительно объемных, изменения кристаллического поля вблизи поверхности и соответствующие изменения направления магнитных 4f-моментов [2].

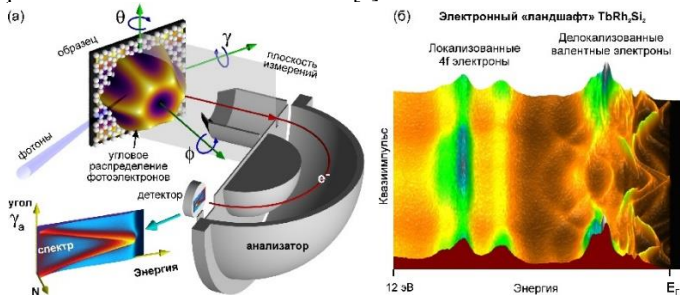


Рис. 1. (а) Схема эксперимента ФЭСУР. (б) Пример данных ФЭСУР для TbRh_2Si_2 . Работа выполнена при поддержке СПбГУ (грант № 95442847).

1. W. Schattke, M. A. Van Hove (Eds.), *Solid-State Photoemission and Related Methods*. WILEY-VCH (2003).

2. D.Yu. Usachov et al. *J. Phys. Chem. Lett.* 13, 7861 (2022); *Phys. Rev. Lett.* 124, 237202 (2020); *Phys. Rev. B* 102, 205102 (2020); *Phys. Rev. B* 109, L241118 (2024).

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА СВЕРХПРОВОДЯЩИХ И МАГНИТНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ

Фролов А.С.¹

¹ *Московский физико-технический институт, Москва, Россия
e-mail: frolov.as@mipt.ru, тел.: 8 (996) 9613491*

Системы с нетривиальной топологией зонной структуры являются предметом интереса современной физики конденсированного состояния. Одним из примеров таких систем являются топологические изоляторы (ТИ) — материалы, обладающие запрещённой зоной в объёме и металлическими состояниями на поверхности. Благодаря нетривиальной топологии объёмных зон, электронные состояния поверхности ТИ демонстрируют ряд уникальных особенностей, таких как близкий к линейному закон дисперсии и наличие связи между спином и квазиимпульсом электрона.

Функциональные свойства топологических изоляторов могут значительно изменяться при наличии магнитного или сверхпроводящего порядка. Соответствующие материалы относятся к подклассам магнитных и сверхпроводящих топологических изоляторов, поиск и исследование которых представляет значительный интерес в контексте их потенциальных приложений в спинтронике, квантовых и нейроморфных вычислениях. В этой связи наиболее перспективным является семейство магнитных топологических изоляторов (МТИ), производных от структуры $MnBi_2Te_4$ [1]. Этот родоначальник семейства имеет слоистую структуру, состоящую из семислойных блоков $[Te-Bi-Te-Mn-Te-Bi-Te]$, связанных Ван-дер-Ваальсовыми взаимодействиями. Антиферромагнитный порядок А-типа формируется магнитными моментами атомов марганца, что позволяет применять Z_2 -классификацию для этого соединения [2,3]. Возникновение магнитного порядка приводит к образованию запрещённой зоны в точке Дирака поверхностных состояний [4]. Предсказано, что возникновение сверхпроводящих корреляций в топологических изоляторах приводит к формированию фермионов майорана на поверхности, которые могут быть локализованы в коре вихря [5,6]. Поиск таких объектов ведётся как на основе систем с эффектом близости [5], так и на основе собственных сверхпроводящих топологических изоляторов [7].

Экспериментальное исследование свойств топологических защищённых электронных подсистем в основном основывается на методах сканирующей туннельной микроскопии/спектроскопии и фотоэмиссионной спектроскопии. Сочетание этих методов позволяет получить комплементарную информацию об объекте исследования. В докладе будет представлен обзор существующих методов и подходов к изучению электронных свойств ТИ, СТИ и МТИ. Основное внимание будет уделено синергии методов, обеспечивающих высокое пространственное разрешение, таких как сканирующая зондовая микроскопия, и интегральных методов, таких как фотоэмиссионная спектроскопия с угловым разрешением.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 22-72-10074.

1. Tokura Y., Yasuda K., Tsukazaki A. Nat Rev Phys. 2019, 1, 2, 126–143.

2. Otrokov M.M. et al. *Nature*. 2019. 576, 7787. 416–422.
3. Frolov A.S. et al. *Commun. Phys.* 2024. 7, 1. 180.
4. Estyunin D.A. et al. *Apl Mater.* 2020. 8, 2. 021105.
5. Fu L., Kane C.L. *Phys. Rev. Lett.* 2008. 100. 096407.
6. Hosur P. et al. *Phys. Rev. Lett.* 2010. 107, 9. 097001.
7. Hor Y.S. et al. *Phys. Rev. Lett.* 2010. 104. 057001.

НАНО- И МИКРОМАТЕРИАЛЫ КАК МОДУЛЯТОРЫ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ФЕРМЕНТОВ

Холявка М.Г.^{1,2}, Гончарова С.С.¹, Редько Ю.А.¹, Лавлинская М.С.¹, Сорокин А.В.¹, Кондратьев М.С.^{1,3}, Артюхов В.Г.¹

¹*Воронежский государственный университет, г. Воронеж, Россия*

²*Севастопольский государственный университет, г. Севастополь, Россия*

³*Институт биофизики клетки РАН – обособленное подразделение ФИЦ «Пуцинский научный центр биологических исследований РАН», г. Пуццино, Россия*

e-mail: holyavka@rambler.ru, тел.: 8 (473) 2208586

Ферменты являются экологически чистыми биокатализаторами, широко используемыми в различных отраслях промышленности и медицине. Однако их масштабное внедрение сталкивается с такими проблемами, как нестабильность молекул ферментов в различных условиях. Рациональным путем решения названной проблемы может стать иммобилизация ферментов с использованием нано- и микроматериалов в качестве носителей, которая повысит стабильность ферментов по отношению к действию температур, растворителей, экстремальных значений pH среды, загрязняющих веществ и примесей [1, 2]. Кроме того, в настоящее время иммобилизация выступает как мощный инструмент для модуляции различных свойств ферментов, улучшения характеристик биокатализаторов и повышения производительности биореакторов [3]. Материалы, используемые для разработки новых типов гибридных биокатализаторов, включают синтетические полимеры, наноматериалы на основе углерода, магнитные микро- и наночастицы, наночастицы металлов и оксидов металлов, металлоорганические каркасы, наноразмерные мезопористые органические каркасы, нано- и микроматериалы на основе белков, липидов и полисахаридов [4].

Комплексы ферментов с микро- и наночастицами биополимеров представляют собой гибридную, но при этом гомогенную форму. Селективность гомогенной формы значительно выше по сравнению с гетерогенной формой и достигает 70–95%.

Нами были получены микро- и наночастицы среднемолекулярного и высокомолекулярного хитозанов и карбоксиметилхитозанов без и с добавлением аскорбиновой кислоты. Разработаны методики получения комплексов этих микро- и наночастиц с растительными протеазами – фицином, папаином и бромелином [5]. Показано, что активность комплексов цистеиновых протеаз с микро- и наночастицами карбоксиметилхитозана оказалась выше по сравнению с комплексами ферментов с микро- и наночастицами немодифицированного хитозана.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 21-74-20053

1. Холявка М.Г., Артюхов В.Г. Иммобилизованные биологические системы: биофизические аспекты и практическое применение (учебное пособие). Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2017, 261 с.

2. Холявка М.Г., Наквасина М.А., Артюхов В.Г. Практикум по биотехнологии: иммобилизованные биологические объекты в системе лабораторных работ. Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2017, 161 с.

3. Artyukhov V.G., Holyavka M.G., Kovaleva T.A. Structural and functional properties of inulinases. Ways to regulate their activity. *Biophysics*, 2013, 58, p. 493–501, DOI: 10.1134/S0006350913040039

4. Holyavka M.G., Goncharova S.S., Redko Y.A., Lavlinskaya M.S., Sorokin A.V., Artyukhov V.G. Novel biocatalysts based on enzymes in complexes with nano and micromaterials. *Biophysical Reviews*, 2023, 15, 1127–1158, DOI: 10.1007/s12551-023-01146-6

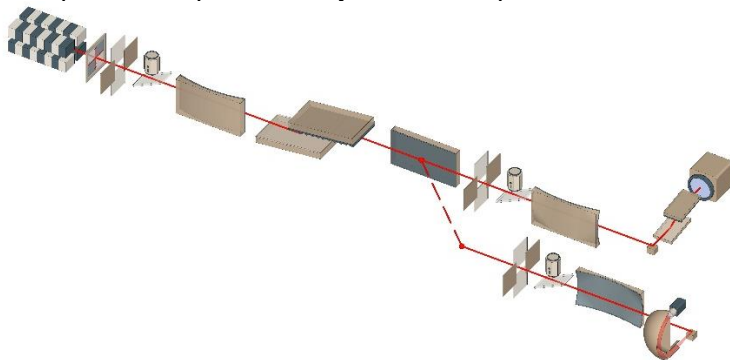
5. Ol'shannikova S.S., Red'ko Yu.A., Lavlinskaya M.S., Sorokin A.V., Holyavka M.G., Artyukhov V.G. Preparation of papain complexes with chitosan microparticles and evaluation of their stability using the enzyme activity level. *Pharmaceutical Chemistry Journal*, 2022, 55, 1240-1244. DOI 10.1007/s11094-022-02564-8

ВОЗМОЖНОСТИ СПЕКТРОСКОПИИ В МЯГКОМ РЕНТГЕНОВСКОМ ДИАПАЗОНЕ НА СТРОЯЩЕЙСЯ УСТАНОВКЕ «СИЛА» Г. ПРОТВИНО

Чумаков Р.Г.

*НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
e-mail: chumakov_rg@nrcki.ru, тел.: 8 (985) 9143642*

В настоящий момент в рамках реализации Федеральной научно-технической программы развития синхротронной и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры [1] осуществляется разработка и строительство целой сети передовых синхротронных исследовательских установок. К ним относятся синхротроны СКИФ в новосибирской области, РИФ на острове Русский, технологический накопительный комплекс в г. Зеленоград, модернизированный Курчатовский источник синхротронного излучения в г. Москва и установка СИЛА в г. Протвино. Структура установки СИЛА объединяет в себе источник синхротронного излучения четвертого поколения и лазер на свободных электронах с энергией электронов 6 ГэВ. Использование современных ускорительных технологий при создании ускорителя позволит значительно уменьшить горизонтальный эмиттанс пучка электронов до $72 \text{ пм} \cdot \text{рад}$ [2], что приведет к достижению рекордных значений яркости и когерентности излучения на экспериментальных станциях.



Уникальные параметры установки СИЛА открывают новые возможности для реализации измерительных экспериментальных методик, ранее недоступных на отечественных источниках синхротронного излучения. Для спектроскопии в области мягкого рентгеновского диапазона появляются технические возможности для реализации методов фотоэлектронной спектроскопии с временным и спиновым разрешением, фотоэлектронной спектроскопии в жестком рентгеновском диапазоне, время-разрешенной спектроскопии рентгеновского поглощения, а так же спектроскопии резонансного неупругого рассеяния излучения, в том числе с временным разрешением. В настоящей работе представлены проекты спектроскопических станций на установке СИЛА, их оптические схемы, экспериментальные возможности и ключевые параметры.

1. Постановление Правительства Российской Федерации от 16 марта 2020 г. № 287 "Об утверждении Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019 - 2027 годы".

2. Гавриш Ю. Н., Филатов О. Г., Зуев Ю. В., Благов А. Е., Пресняков М. Ю., Таргонский А. В., Самарин А. В., Ковальчук М. В., Дюбков В. С., Юрин И. А., Индошный Е. Н. Ускорительно-накопительный комплекс мегаустановки СИЛА, Письма в ЭЧАЯ. 2024. Т. 21, № 3(254). С. 257–265

ДИАГНОСТИКА МЕТАЛЛСОДЕРЖАЩИХ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ С УГЛЕРОДНЫМИ МАТРИЦАМИ: КОРРЕЛЯЦИЯ СОСТАВ-СТРУКТУРА-СВОЙСТВА

Яловега Г.Э.

*Южный Федеральный Университет, г. Ростов-на-Дону
e-mail: yalovega@sfnedu.ru, тел.: 8 (928) 7716657*

Особую роль в создании нанокompозитных материалов для суперконденсаторов и сенсоров играет характер корреляционных связей в рамках фундаментального треугольника состав-структура-свойство. Синтез новых материалов с электронной и ионной проводимостью требует фундаментального понимания принципов работы материалов, обеспечиваемого как экспериментальными, так и теоретическими исследованиями.

Комплементарные исследования методами SEM, EDX, PXRD, FT-IR, Raman, UV-vis, XPS и XANES спектроскопии проводились с использованием лабораторных и синхротронных источников Курчатовский институт, Bessy, Elettra. Показаны результаты исследований состава, структуры и свойств композитных материалов в полимерных матрицах Me(Co,Cu)/полиакрилонитрил и Me(Cu,Mn)/полианилин@GO, межфазных границ в MeO_x(Me – Cu, Ni)/MWNTs и других.

Целью проведенных исследований являлось определение межфазных взаимодействий между металлами и углеродными составляющими композитов, определение механизмов и уровня легирования. Показано, как в зависимости от типа взаимодействия изменяется перенос, концентрация носителей заряда и, как следствие, электрохимические и электрофизические характеристики композитов.

Исследование выполнено частично за счет средств гранта Российского научного фонда № 23-22-00459 в Южном Федеральном Университете.

МЕТОДЫ ДИАГНОСТИКИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ КРИСТАЛЛОВ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДИЭЛЕКТРИКОВ И ПОДОБНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Яшина Л.В.

¹ *Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова
e-mail: yashina@inorg.chem.msu.ru, тел.: +7 (916) 3808641*

Топологические изоляторы представляют собой новый вид квантовых объектов с сильным спин-орбитальным взаимодействием, приводящим к инверсии зон; при определенных условиях симметрии на границе с тривиальным диэлектриком в электронной зонной структуре реализуются топологические поверхностные состояния (ТПС), обладающие линейной дисперсией и спиновой поляризацией. Такие материалы должны быть реализованы в виде монокристаллов или эпитаксиальных пленок. Прототипические топологические диэлектрики со структурой тетрадимита получают в виде объемных кристаллов при помощи методов выращивания из расплава, раствора в расплаве и газовой фазы и пленок, как правило при помощи молекулярно-лучевой эпитаксии. Для тонкой подстройки свойств синтезируют твердые растворы переменного состава. При синтезе материала задаются такими параметрами как кристаллическая структура, состав кристалла, а именно распределение элементов в объеме материала на различном масштабе наблюдения, структурное совершенство кристалла, размер и форма кристаллов. Зонная структура материала определяется их составом, дефектным составом, заселенностью атомных позиций.

В докладе обсуждаются комплекс современных методов синтеза и диагностики 4-5 компонентных кристаллов, включая рентгеновскую дифракцию высокого разрешения, рентгено-флуоресцентный и микрозондовый анализ, фотоэмиссионную спектроскопию и зондовую микроскопию/спектроскопию и просвечивающую электронную микроскопию, а также рентгеновскую спектроскопию с атомным разрешением. Особое внимание уделено методам исследования поверхностей, в том числе в контакте с газовой средой в условиях *in situ* наблюдений.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 19-42-06303).

ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ СТРУКТУРА СИСТЕМЫ 3d-МЕТАЛЛ – ЛЕГКИЙ ЭЛЕМЕНТ: ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ СОВМЕСТНОГО АНАЛИЗА EXAFS И EXELFS ДАННЫХ.

Аверкиев И.К., Бакиева О.Р.

*УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия
e-mail: averkiev1997@mail.ru, 8 (3412) 430163*

Материалы на основе системы 3d-металл – легкий элемент (от Li до F) являются основой для множества приложений в различных областях науки и техники. Практическое применение этих материалов расширилось с появлением наноматериалов. Переход из объемных материалов к наноразмерным приводит к обнаружению новых физико-химических свойств. Чаще всего это обусловлено с перестройкой ближнего порядка, а именно изменением межатомных расстояний и координационных чисел. Методы с использованием рентгеновского излучения являются мощными инструментами изучения локального окружения вокруг атома определенного типа. Среди методов выделяется спектроскопия протяженной тонкой структуры рентгеновского поглощения (EXAFS). В основе метода лежит регистрация когерентного рассеяния фотоэлектрона на локальном окружении возбуждаемого атома [1].

Процессы когерентного рассеяния электрона на локальном окружении атома возникают и при возбуждении потоком моноэнергетичных электронов. Спектроскопия протяжной тонкой структуры потерь энергии электронов (EXELFS) является EXAFS-подобным методом с использованием электронного зонда, который реализован на лабораторном оборудовании [2]. Поскольку спектры, полученные как с помощью рентгеновского, так и электронного возбуждения имеют одну природу – рассеяние вторичного электрона/фотоэлектрона на ближайшем окружении возбуждаемого атома, то анализ экспериментальных данных можно проводить в рамках решения одной задачи.

В настоящей работе EXAFS и EXELFS данные были объединены в одну систему интегральных уравнений Фредгольма первого рода (обратная некорректно поставленная задача). В качестве метода решения системы интегральных уравнений выбран метод регуляризации по Тихонову [3]. Апробация системы интегральных уравнений была проведена на модельных системах, что позволило нам оценить минимальные погрешности возникающие при нахождении решения. Проведено исследование локальной атомной структуры реальных систем металл/легкий элемент (на примере соединений Ti, TiH₂, TiC Ti₂AlC) с использованием системы интегральных уравнений объединяющих экспериментальные данные EXAFS и EXELFS спектроскопии.

Разработанный метод совместного анализа EXAFS и EXELFS данных позволяет определять структурные параметры широко класса соединений 3d металл-легкий элемент (кислород, углерод). В частности, тонкие пленки оксида железа обладают превосходными электрическими и магнитными свойствами по сравнению с другими материалами, и являются потенциальными электродами для фотоэлектрохимического получения водорода. Определение параметров окружения железа и кислорода необходимо проводить в единых экспериментальных условиях

для получения корректной информации об атомах разного сорта. Исследование тонких пленок оксида железа с помощью разработанного метода позволит одновременно получать параметры локальной атомной структуры и устанавливать взаимосвязь структуры с физико-химическими свойствами.

Исследование выполнено при поддержке Минобрнауки России (договор № 075-15-2021-1351) в части развития методологии рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и спектроскопии рентгеновского поглощения.

1. Rehr J. J. and Albers R. C. Rev. Mod. Phys, 72, 621.
2. Бакиева О. Р., Немцова О. М., Сурнин Д. В. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 10, 2015, С. 53.
3. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. - М.: Наука, 1979, 283 с.

СЕЛЕКТИВНОЕ ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ХЛОРА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ СЕНСОРАМИ ZnO

Аль Хабиб А.А.К.¹, Куликов М.Ю.¹, Белов М.Ю.¹, Шапошник А.В.², Рябцев С.В.¹

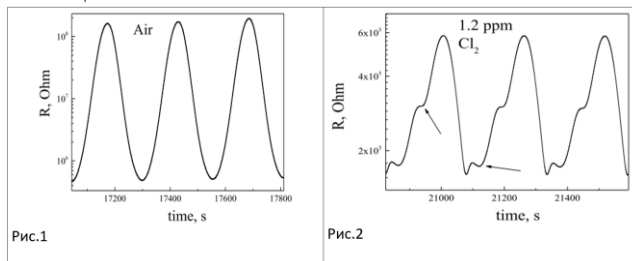
¹Воронежский Государственный университет, Университетская пл., 1, Воронеж.

²Воронежский Государственный Аграрный университет, ул. Мичурина, 1, Воронеж.

e-mail: azalalhabeeb8582@gmail.com, тел.: 8 (473) 2208363

Целью настоящей работы является увеличение селективности полупроводниковых газовых сенсоров на основе ZnO к хлору с концентрациями ниже предельно допустимыми для рабочей зоны. Тонкопленочные образцы ZnO были получены путем магнетронного напыления слоя металлического Zn на специально изготовленные тестовые структуры с Pt электродами, нагревателем и термометром сопротивления. Затем пленки окислялись на воздухе при температуре 450 °С. Толщина полученных пленок ZnO составляла ~30 нм. Проведена характеристика образцов методами РФА, микроскопии, оптической спектроскопии, которые подтвердили ожидаемый состав, морфологию и физико-химические свойства полученных пленок ZnO.

Далее был исследован резистивный отклик сенсора ZnO для различных концентрациях хлора, озона и двуокси азота при постоянной температуре 150 °С, а так же сенсоров других составов для сравнения: SnO₂, In₂O₃, WO₃, CdO. Отклик для всех газов и сенсоров при постоянной температуре имел вид степенной функции обычный для сенсоров. Такие сигналы малоинформативны для решения задач селективности. Для повышения селективности индивидуальных сенсоров применяют другой режим работы сенсоров-при переменной температуре и оптической активации хемосорбционных процессов. Температура сенсоров в нашем случае изменялась по синусоидальному закону от 50 до 300 °С. Оптическая активация осуществлялась УФ светодиодом ($\lambda=365$ нм). Как видно из рис.1 в среде чистого воздуха отклик сенсора ZnO определяется только зависимостью сопротивления полупроводника от температуры. В среде содержащей хлор (рис.2) отклик носит более сложный характер, определяемый спецификой хемосорбции хлора с поверхностью ZnO. Другие изученные окислы и газы не имели таких особенностей, что позволяет говорить о возможности селективного детектирования хлора сенсорами на основе ZnO при переменной рабочей температуре и оптической активации.



АДСОРБЦИЯ ДИПОЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ C₆₀F₁₈ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТЯХ

Андреев А.А.¹, Чумаков Р.Г.¹

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
e-mail: andreev_artik@mail.ru, тел.: 8 (927) 8626958

В последние годы органические материалы всё чаще используются в молекулярной электронике. Особое внимание уделяется фуллеренам и их производным, а именно фторидам фуллерена, которые нашли применение в создании электроактивных элементов в солнечных батареях [1], слоях в тонкопленочном органическом транзисторе [2], а также для создания органических светоизлучающих диодов Шоттки [3]. Фторид фуллерена C₆₀F₁₈ обладает собственным электрическим дипольным моментом, что стало предметом перспективных исследований [4, 5]. В данных работах проводилось исследование адсорбции C₆₀F₁₈ на поверхностях Cu(001), Au(111) и Ni(100). Однако поведение данных молекул на диэлектрических поверхностях все ещё остается актуальным вопросом для применения в реальных элементах микроэлектроники.

Методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) на станции «НаноФЭС» [6] было проведено исследование фундаментальных физико-химических явлений, происходящих при адсорбции дипольных молекул фторида фуллерена C₆₀F₁₈ на диэлектрических поверхностях оксида кремния SiO₂ /Si(001) и германия GeO₂ /Ge(111). Создание образцов тонких пленок молекул C₆₀F₁₈ проводилось методом молекулярно-пучковой эпитаксии в условиях сверхвысокого вакуума.

В ходе выполнения данной работы были определены типы адсорбции дипольных молекул и характер их самоорганизации на поверхностях в зависимости от материала подложки. Полученные данные могут оказаться полезными для создания элементов молекулярной электроники.

1. Haddon R.C., Perel A.S., Morris R.C. et al. // *Appl.Phys. Lett.* 1995. 67, №1. P. 121.
2. Kobozono Y., Nagano T., Haruyama Y. et al. // *Appl.Phys. Lett.* 2005. 87, №14. P. 143506.
3. Pahner P., Kleemann H., Burtone L. et al. // *Phys.Rev. B.* 2013. 88, Iss. 19. 195205.
4. A.I. Oreshkin et al., «Real-time decay of fluorinated fullerene molecules on Cu(001) surface controlled by initial coverage», *Nano Res.*, pp. 1–14, Sep. 2017.
5. Bairagi K. et al. STM study of C₆₀F₁₈ high dipole moment molecules on Au (111) // *Surface Science.* – 2015. – Т. 641. – С. 248—251.
6. А.М. Лебедев, К.А. Меньшиков, В.Г. Назин, В.Г. Станкевич, М.Б. Цетлин, Р.Г. Чумаков, Поверхность. Рентгеновские, синхронные и нейтронные исследования, 2021, 10, 44.

МОДИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МАГНИТНОГО ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА $MnBi_2Te_4$ ПРИ КОНТАКТЕ СО СЛОЯМИ МАГНИТНЫХ АТОМОВ Co И ТЯЖЕЛЫХ АТОМОВ Au

Анферова В.В.¹, Шикин А.М.¹, Тарасов А.В.^{1,2}

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

² Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия
e-mail: st085002@student.spbu.ru, тел.: 8 (961) 8035353

Магнитные топологические изоляторы (МТИ) представляют значительный интерес для исследований, поскольку сочетают в себе нетривиальную зонную топологию и магнитный порядок [1]. Благодаря этому в них проявляется ряд интересных эффектов, среди которых квантовый аномальный эффект Холла (КАЭХ) [2]. Магнитное взаимодействие в МТИ нарушает симметрию обращения времени, что приводит к открытию энергетической запрещенной зоны (ЭЗЗ) в электронной структуре топологических поверхностных состояний (ТПС) [3]. Примером такой системы является антиферромагнитный топологический изолятор (АФМ ТИ) $MnBi_2Te_4$ [4]. Примечательно, что экспериментальные исследования электронной структуры $MnBi_2Te_4$ показывают значительные вариации величины ЭЗЗ для различных образцов кристалла [5-6]. Эти наблюдения имеют важное значение, поскольку величина ЭЗЗ является одним из ключевых параметров, определяющих возможность наблюдения КАЭХ в системе, а значит и перспективы использования этого материала в электронных устройствах [7]. Уменьшение ЭЗЗ в экспериментальных наблюдениях может быть связано с наличием дефектов на поверхности кристалла, которые приводят к снижению магнитного и спин-орбитального взаимодействия в системе по сравнению с модельной системой [8].

Цель данной работы заключается в теоретической оценке возможности модулирования ЭЗЗ в ТПС кристалла $MnBi_2Te_4$ путем нанесения на его поверхность магнитных атомов Co для увеличения магнетизма или тяжелых атомов Au для усиления спин-орбитального взаимодействия. Это может компенсировать уменьшение ЭЗЗ, вызванное дефектами поверхности. В исследовании также учитывались такие факторы, как конфигурация расположения нанесенных атомов и расстояние от наносимого слоя до поверхности кристалла.

В качестве метода исследования используется теория функционала плотности (ТФП), позволяющая теоретически рассчитать электронную структуру и оценить возможности контроля величины ЭЗЗ в ТПС с помощью заявленных подходов.

В работе представлены и проанализированы изменения электронной структуры $MnBi_2Te_4$ при нанесении на его поверхность слоев Co и Au . Полученные результаты показывают, что электронная структура таких систем значительно зависит от конфигурации интерфейса, расстояния между адслоем и поверхностью, а также от концентрации наносимых атомов. Определяющим фактором является энергетическое положение зон адатомов. Расчеты, выполненные в рамках ТФП, показывают, что если энергетические уровни адатомов находятся ниже или выше точки Дирака, то ТПС сохраняются; однако, если состояния адслоя оказываются

вблизи точки Дирака, то ТПС разрушаются. Этот факт подтверждается восстановлением ТПС при смещении зон адслоя от точки Дирака под воздействием поверхностного заряда. Кроме того, в случае интерфейса $\text{Co/MnBi}_2\text{Te}_4$ было обнаружено, что зоны Co смещаются вниз при уменьшении расстояния между адслоем и кристаллом. Для системы $\text{Au/MnBi}_2\text{Te}_4$ наблюдается обратный эффект: зоны Au смещаются вниз при увеличении расстояния между адслоем и кристаллом. Помимо этого, для $\text{Au/MnBi}_2\text{Te}_4$ при уменьшении расстояния отмечено увеличение ЭЗЗ до 1,5 раз.

Таким образом результаты данной работы показывают, что нанесение слоев Co и Au может приводить к изменению величины ЭЗЗ, однако величина изменения и ее направление в значительной мере определяются структурой наносимого слоя.

Работа выполнена при поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (грант 95442847).

1. M. Z. Hasan and C. L. Kane, Rev. Mod. Phys., 2010, 82, 3045.
2. Rui Yu и др., Science, 2010, 329.5987, 1095-9203
3. Yoshinori Tokura, Kenji Yasuda, Atsushi Tsukazaki, Nat. Rev. Phys., 2019, 1.2, 126-143.
4. М. М. Отроков и др., Nat. Rev. Phys., 2019, 576.7787, 416-422.
5. Т. П. Макарова и др., ЖЭТФ, 2023, 163.5, 708-716.
6. Т. П. Естюнина и др., Письма в ЖЭТФ, 2024, 119.6, 439-445.
7. Cui-Zu Chang, Chao-Xing Liu, and Allan H. MacDonald, Rev. Mod. Phys., 2023, 95, 011002.
8. Felix Lüpke, Marek Kolmer, Jiaqiang Yan, Hao Chang, Paolo Vilmercati, Hanno H. Weitering, Wonhee Ko, An-Ping Li, Commun. Mater., 2023, 4, 82.

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ AG В ПЛЕНКАХ AG-Si, ПОЛУЧЕННЫХ ИОННО-ЛУЧЕВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ

Бабаков В.В., Барков К.А., Терехов В.А., Ивков С.А., Нестеров Д.Н.¹

¹ *Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
e-mail: barkov@phys.vsu.ru*

Наноструктурированные композитные материалы, содержащие наночастицы серебра, являются перспективным материалом для технологии изготовления SERS-подложек, используемых для наблюдения эффекта поверхностно усиленного комбинационного рассеяния (гигантское рамановское рассеяние) [1], а также могут обладать рядом уникальных свойств, такими как высокая фоточувствительность и усиление фототока. Для получения данных нанокompозитов, как правило, используют такие методы как магнетронное напыление, ионно-лучевое распыление, лазерную абляцию и т.д. При этом в композитной пленке могут происходить сложные межфазные взаимодействия с формированием метастабильных фаз [2], обладающих не характерными для стабильных фаз свойствами. Поэтому вопрос о фазовом составе пленок Ag-Si, полученных в неравновесных условиях, требует детального изучения.

Нанокompозитные пленки Ag-Si (толщиной 1 мкм) с различным содержанием Si (от 21% до 47%) были получены с помощью ионно-лучевого распыления на подложках Si (100) в вакууме при давлении $1 \cdot 10^{-5}$ торр. Рентгенофазовый анализ проводился на дифрактометре PANalytical Empyrean, элементный состав исследовался на РЭМ JEOL JSM-6380LV с системой микроанализа INCA 250, электронное строение валентной зоны пленок Ag-Si анализировалось по ультрамягким рентгеновским эмиссионным SiL_{2,3}-спектрам на рентгеновском спектрометре-монокроматоре PCM-500 при энергии первичных электронов 1kV (глубина анализа ~10 нм) [3]. Для определения микрорельефа, и фактора шероховатости поверхности использовался метод АСМ на сканирующем зондовом микроскопе Solver P47. На специальной измерительной установке рассчитаны ВАХи пленок на постоянном токе в диапазоне напряжений от -5 до 5 В с шагом 0,2 В.

Результаты рентгенодифрактометрических исследований показывают, что Ag в композитной пленке находится в нанокристаллическом состоянии, что хорошо видно по уширению дифракционной линии Ag(111), в то время как фаза кристаллического кремния отсутствует. При этом с увеличением содержания Si в пленках Ag-Si средние размеры нанокристаллов Ag в образцах уменьшаются от 15 нм (содержание Si-21%) до 10 нм вплоть до состава с содержанием Si-47%. Что хорошо согласуется с данными, полученными методом атомно-силовой микроскопии, где средние размеры нанокристаллов составили 8 нм. Кроме того, в образце с содержанием Si-47% наблюдается значительная асимметрия рефлекса Ag(111), что может быть связано с формированием твердого раствора на основе серебра, как это было ранее обнаружено в пленках Al-Si [2].

В то же время, результаты анализа фазового состава пленок Ag-Si по рентгеновским эмиссионным SiL_{2,3}-спектрам показывают, что кремний в пленках

находится в основном в виде аморфного кремния (a-Si-60%) и субоксида кремния (SiO_x ~40% со степенью окисления «x» ~1.9).

Также по данным вольт-амперных характеристик в пленках Ag-Si была обнаружена зависимость роста электрического сопротивления от ~2,5 до ~55 Ом, с увеличением содержания кремния от ~21% до ~47%. При этом пленка с содержанием кремния ~21% демонстрирует переключение из высокоомного состояния (~934 Ом) в низкоомное (~1 Ом) то есть обладает мемристорным эффектом.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда № 23-79-10294.

1. Шлюкер С. Поверхностно-усиленная рамановская спектроскопия (SERS), Техносфера, 2017, 332.

2. Терехов В. А., Усольцева Д. С., Сербин О. В., Физика твердого тела, 2018, 60:5, 1005–1011.

3. Зимкина Т.М., Фомичев В.А., Ультрамягкая рентгеновская спектроскопия – Изд-во Ленинградского университета, 1971, 132.

КОМПЛЕКСНЫЕ СПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НИР- МОДИФИЦИРОВАННОГО ФУЛЛЕРИТА C₇₀

Бакина К.А., Петрова О.В., Скандаков Р.Н., Рутковский В.О., Некипелов С.В.,
Сивков В.Н.

ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, Россия
e-mail: tylxen@gmail.com, тел.: 8 (8212) 391461

Исследования показали, что коллапс фуллеренов под высоким давлением при высокой температуре даёт новые наноструктурированные наноуглеродные фазы с выдающимися механическими свойствами, такими как электропроводность и высокая твёрдость [1–3]. Ранние исследования в этой области главным образом были сосредоточены на фуллерите C₆₀, однако более поздние работы показали перспективность высокотемпературной модификации и других фуллеритов, в частности, C₇₀ [4,5].

В настоящей работе проведено комплексное исследование подвергнутого высокотемпературной газостатической обработке (hot isostatic pressure, HIP) фуллерита C₇₀, с использованием следующих методов: спектроскопия комбинационного рассеяния (Raman spectroscopy), рентгеноструктурный анализ (X-ray diffraction, XRD), рентгеновская абсорбционная (near edge X-ray absorption fine structure, NEXAFS) и фотоэлектронная (X-ray photoelectron spectroscopy, XPS) спектроскопии. Применение таких взаимодополняющих, высокоинформативных на наноуровне методов обусловлено сложностью атомно-электронной структуры исследуемого материала. Данные методы позволяют получить информацию об атомной структуре исследуемой многоатомной системы, а также выявить возникшие вследствие физических и химических воздействий на образец изменения в его атомно-электронной структуре. Для приготовления образцов использовался порошок фуллеритов C₇₀ чистотой 99.98% (ЗАО «Фуллерен-центр», г. Нижний Новгород), который был подвергнут HIP-обработке в инертной атмосфере аргона при давлении 0.1 ГПа и температурах 900 и 1000 К.

Путём сравнения полученных спектров исходного фуллерита C₇₀ и фуллерита C₇₀, подвергнутого HIP-обработке, было показано, что в HIP-модифицированном фуллерите происходит слияние молекул C₇₀ с образованием ковалентных связей между атомами углерода с одновременным формированием замкнутых графеновых нанокапсул.

Исследования методом спектроскопии комбинационного рассеяния осуществлялись с использованием оборудования Центра коллективного пользования (ЦКП) Института геологии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН (г. Сыктывкар), XRD-анализ — с использованием оборудования ЦКП «Физика и технология микро- и наноструктур» ИФМ РАН (г. Нижний Новгород). Исследования методом NEXAFS-спектроскопии выполнялись с использованием синхротронного излучения Русско-немецкого канала выхода и монохроматизации излучения синхротронного центра BESSY-II (г. Берлин, Германия), а XPS-спектры были получены в ресурсном центре «Физические методы исследования поверхности» научного парка СПбГУ с помощью спектрометра Thermo Scientific ESCALAB 250Xi (г. Санкт-Петербург).

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351.

1. Blank V.D. *et al.*, Carbon, 1998, 36(4), 319-343.
2. Nunez-Regueiro M. *et al.*, Physical review letters, 1995, 74(2), 278.
3. Marques L., Skorokhod Y., Soares R., Carbon, 2015, 82, 599-603.
4. Marques L., Skorokhod Y., Soares R., physica status solidi – Rapid Research Letters, 2015, 9(9), 535-538.
5. Bagramov R. *et al.*, Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, 2016, 24(1), 20-24.

ФОРМИРОВАНИЕ МЕТАСТАБИЛЬНОЙ ФАЗЫ Al_3Si В ПЛЕНКАХ Al-Si , ПОЛУЧЕННЫХ МАГНЕТРОННЫМ И ИОННО-ЛУЧЕВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ

Барков К.А.¹, Терехов В.А.¹, Ивков С.А.¹, Домашевская Э.П.¹, Курганский С.И.¹, Моисеев К.М.², Хыдырова С.Ю.², В.Р. Радица¹, Керсновский Е.С.¹, Польшин И.В.¹, Нестеров Д.Н.¹, Буйлов Н.С.¹, Ситников А.В.³

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

³ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

e-mail: barkov@phys.vsu.ru, тел.: 8 (473) 208363

Сплавы алюминия с кремнием (силумины) находят широкое применение в различных областях техники [1]. Однако при нанесении нанокompозитных плёнок на основе Al-Si , такими методами, как магнетронное и ионно-лучевое распыление, а также лазерная абляция, которые характеризуются достаточно высокой энергией частиц, падающих на подложку при получении пленок, не исключена вероятность образования метастабильных фаз при охлаждении частиц на подложке [2].

Плётки с разным атомным составом $\text{Al}_{0,75}\text{Si}_{0,25}$, $\text{Al}_{0,62}\text{Si}_{0,38}$ и $\text{Al}_{0,55}\text{Si}_{0,45}$ толщиной около 300 нм были получены на подложках $\text{Si}(100)$ методами магнетронного и ионно-лучевого распыления составных мишеней. Анализ структуры и фазового состава пленок Al-Si проводился с помощью методов рентгеновской дифракции и ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС). Расчёты зонной структуры и рентгеновских спектров проводились в рамках теории функционала плотности (DFT) методом линейаризованных присоединённых плоских волн (LAPW).

В результате рентгеноструктурных исследований пленок Al-Si , полученных методами магнетронного и ионно-лучевого распыления, было обнаружено образование упорядоченного твердого раствора Al_3Si со структурой типа Cu_3Au ($Pm\bar{3}m$), но примитивные подрешетки которого заполнены атомами двух сортов Al и Si .

При этом доля фазы Al_3Si от общего объема магнетронной пленки не велика по сравнению со стабильными фазами Al и Si . В то же время в ионно-лучевых пленках Al-Si фаза Al_3Si является основной и достаточно устойчива к изменениям элементного состава от $\text{Al}_{0,75}\text{Si}_{0,25}$ до $\text{Al}_{0,55}\text{Si}_{0,45}$.

Анализ плотности электронных состояний в валентной зоне пленок Al-Si с помощью рентгеновских $\text{Al } L_{2,3}$ - и $\text{Si } L_{2,3}$ -спектров показывает, что распределение валентных состояний $\text{Si } 3s$ в ионно-лучевых пленках напоминает распределение валентных состояний кремния в низших силицидах металлов. Теоретически рассчитанные рентгеновские спектры (DFT) для фазы Al_3Si хорошо согласуются с экспериментальными. Это еще раз подтверждает образование метастабильной фазы Al_3Si в тонких пленках, полученных методами магнетронного и ионно-лучевого распыления.

Таким образом, по данным рентгеновской дифракции, рентгеновской спектроскопии, а также теоретического расчета зонной структуры подтверждено

образование упорядоченной фазы Al_3Si в магнетронных и ионно-лучевых пленках Al-Si с достаточно широким диапазоном однородности.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10294, <https://rscf.ru/project/23-79-10294/>.

1. C. Choudhary et al. Mater. Sci. Technol, 2020, 36, 181.
2. V.A. Terekhov et. al. Thin Solid Films, 2023, 772, 139816.

НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫЕ ПОКРЫТИЯ КОБАЛЬТА НА ПОВЕРХНОСТИ ПОРИСТОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

Барышев А.О.¹ Валеев Р.Г.²

¹УдГУ, Ижевск, Россия

²УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

e-mail: lesha.barishev@gmail.com

В настоящее время востребованы датчики и исполнительные механизмы (например, фильтры), устройства сверхплотной записи информации, основанные на использовании магнитных свойств материалов. При этом тенденции к миниатюризации и уменьшения энергопотребления требуют проведение исследований, нацеленных на получение новых свойств материалов, что позволит получить указанные выше изделия с необходимыми параметрами.

Пленки на основе кобальта начали изучать в 70-х годах 20-го века как основу для создания высококоэрцитивных материалов для магнитной записи [1], кобальтовые фольги изучаются как перспективные материалы для окисления метана [2], восстановления метана из монооксида углерода (CO) [3], конверсии CO₂ [4]. Кобальтсодержащие катоды используются в литий-ионных батареях и аккумуляторах [5], хотя в последние годы разрабатывают альтернативные материалы с низким содержанием кобальта из-за сложности его извлечения при переработке и токсичности [6].

Используя новые подходы к получению наноструктурных материалов, например, используя подложки пористого оксида алюминия с наномасштабными порами для магнетронного нанесения покрытий, можно получать пленки с уникальной структурой, представляющей собой покрытие материала с порами [7].

Таким образом, целью данной работы является разработка методики получения покрытий кобальта на пористом оксиде алюминия с различной пористой структурой и изучение их структурного состояния и морфологических параметров.

В данной работе получены и проанализированы структурное состояние и морфологические особенности наноструктурированных покрытий кобальта в зависимости от параметров пористой структуры анодного оксида алюминия.

1. Lazzari J., Melnick I., Randet D. // IEEE Transactions on Magnetics. 1967. V. 3. P. 205-207. DOI: 10.1109/TMAG.1967.1066051.

2. Zhang X., Lee C.S.-M., Mingos D.M.P., Hayward D.O. // Applied Catalysis A: General. 2003. V. 248. P. 129-142. DOI: 10.1016/S0926-860X(03)00154-6.

3. Rytter E., Aaserud C., Hilmen A.-M., Bergene E., Holmen A. // Catalysts. 2022. V. 12. P. 65. DOI: 10.3390/catal12010065.

4. Jimenez J.D., Wen C., Rojko M.M., Kropf A.J., Segre C., Lauterbach J. // ChemCatChem. 2020. V. 12. P. 846. DOI: 10.1002/cctc.201901676/

5. Ahmed S., Nelson P.A., Gallagher K.G., Susarla N., Dees D.W. // Journal of Power Sources. 2017. V. 342. P. 733-740. DOI: 10.1016/j.jpowsour.2016.12.069.

6. Zhao H., Lam W.-Y.A., Sheng L., Wang L., Bai P., Yang Y., Ren D., Xu H., He X. // Adv. Energy Mater. 2022. V. 12. P. 2103894. DOI: 10.1002/aenm.202103894.

7. Valeev R.G., Beltiukov A.N., Alalykin A.S., Kriventsov V.V. // AIP Conference Proceedings. 2020. V. 2299, P. 080001. DOI: 10.1063/5.0030668.

8. Валеев Р.Г., Алалькин А.С. // Российские нанотехнологии. 2019. Т. 14. № 7-8. С. 58-64. DOI: 10.21517/1992-7223-2019-7-8-58-64.

РФЭС ИССЛЕДОВАНИЯ ТОНКИХ МАГНЕТРОННЫХ ПЛЕНОК ОКСИДА ТИТАНА

Бельтюков А.Н., Чукавин А.И., Валеев Р.Г., Картапова Т.С.

*Удмуртский Федеральный Исследовательский Центр УрО РАН, Ижевск,
Россия
e-mail: anb@udman.ru*

Тонкие пленки оксидов вентильных металлов обладают широким спектром различных приложений от защитных покрытий в технике и медицине до функциональных слоев в электронике и микроэлектронике. В полной мере это относится, в том числе, и к титану, являющемуся и конструкционным материалом, и материалом для протезирования, а его тонкие пленки благодаря высокой активности давно используются в качестве адсорбционных подслоев в тонкопленочной микроэлектронике. Кроме того на основе тонкой пленки оксида титана был изготовлен первый мемристор – основной элемент для перспективной нейроморфной микроэлектроники [1]. Функциональные свойства оксидных пленок во многом зависят от их степени стехиометричности, дефектности и толщины. Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС) позволяет контролировать химическое состояние атомов металла в тонких окисных слоях. Однако в естественных условиях и даже в условиях высокого вакуума нестехиометрические оксиды титана на поверхности всегда доокисляются до стабильного TiO_2 . Применение ионного травления для профилирования приводит к восстановлению оксида титана даже при использовании низкоэнергетичных ионов аргона, что препятствует достоверной оценке химического состояния [2].

В данной работе на аттестованной тонкой пленке диоксида титана было показано увеличение доли восстановленной части с увеличением энергии травления от 1 до 4 кэВ. Полученные угловые зависимости остоного уровня $Ti\ 2p$ показывают, что восстановление идет в тонком приповерхностном слое толщиной меньше глубины выхода фотоэлектронов. В случае магнетронной пленки, полученной распылением в условиях недостатка кислорода (5%), использование угловых зависимостей позволило выделить часть спектра, связанного с восстановленной поверхностью (Рис.1). Таким образом, было показано, что при данных условиях напыления в объеме пленки присутствует титан с формальной степенью окисления близкой к +3.

Тонкие пленки оксидов титана получались магнетронным распылением на постоянном токе в среде Ag/O на установке ВУП-5. Аттестация образцов осуществлялась методом рамановской спектроскопии на Оптико-спектральном анализаторе, совмещенном с атомно-силовым микроскопом Ntegra Solaris. РФЭС исследования проводились на лабораторном спектрометре SPECS с энергией возбуждения $Mg\ K\alpha$ (1253,6 эВ).

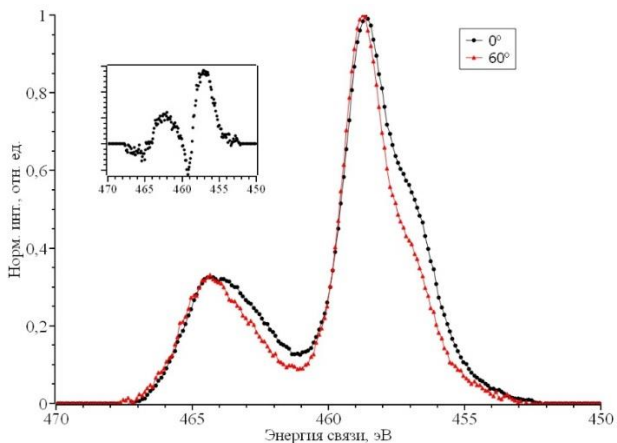


Рис.1. Фотоэлектронные спектры Ti 2p, полученные под углами 0о (черный) и 60о (красный) от нормали к поверхности образца. На вкладке разностный спектр, максимум 357,1 эВ (Ti 2p3/2) соответствует состоянию Ti^{+3} .

Работа выполнена в рамках государственного задания Отдела ФХП УдмФИЦ УрО РАН (№ 121030100002-0).

1. Strukov, D., Snider, G., Stewart, D. et al. The missing memristor found. *Nature* 453, 80–83 (2008). <https://doi.org/10.1038/nature06932>

2. Avilov, V.I., Tominov, R.V., Vakulov, Z.E. et al. Titanium oxide artificial synaptic device: Nanostructure modeling and synthesis, memristive cross-bar fabrication, and resistive switching investigation. *Nano Res.* 16, 10222–10233 (2023). <https://doi.org/10.1007/s12274-023-5639-5>

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПЛЕНОК ОКСИДА ЖЕЛЕЗА НА ПОРИСТОМ ОКСИДЕ АЛЮМИНИЯ

А.Н. Бельтюков, Р.Г. Валеев, А.А. Петков^{1,2}

¹УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск

²Удмуртский государственный университет, Ижевск

Методом магнетронного распыления на установке ВУП-5 осаждались тонкие пленки железа на поверхность пористого оксида алюминия (ПОА) с различными параметрами пористости. После осаждения образцы подвергались отжигу при различных температурах от 150 до 500 °С. В результате отжига на поверхности ПОА сформировались наноструктурированные покрытия оксидов железа. Морфология покрытий исследовалась методами сканирующей электронной и зондовой микроскопии. Рентгеноструктурные исследования показали, что отжиг при температуре 150 °С не приводит к изменению структуры по сравнению с исходной пленкой железа. После отжига при температуре 200 °С появляется небольшой «наплыв» в районе $2\theta \approx 35,1^\circ$, что говорит о начале окисления в фазе $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (магнетит). Отжиг при 300 °С приводит к образованию фазы $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$, после 2 часов отжига появляется также пик $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (гематит). Рентгенофотоэлектронные исследования показали, что после отжига внутри пор может оставаться недоокисленное железо. Методом магнитометрии на вибрационном магнитометре VSM Nuvo MK-2 было проведено исследование кривых намагничивания и магнитных гистерезисов в различной геометрии образцов. Показано, что величина коэрцитивной силы уменьшается с увеличением температуры отжига. С увеличением диаметра пор величина H_c также уменьшается. Методом магнитно-силовой микроскопии проведены исследования распределения магнитных доменов в зависимости от геометрии намагничивания.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351.

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА $\text{Bi}_{1.8}\text{Mn}_{0.1}\text{In}_{0.1}\text{Se}_3$ И $\text{Bi}_{1.8}\text{Co}_{0.1}\text{In}_{0.1}\text{Se}_3$ ПО ДАННЫМ ФОТОЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Беляев Д.В.¹, Радзивончик Д.И.¹, Титова С.Г.², Голяшов В.А.^{3,4}, Кох К.А.⁵, Терещенко О.Е.^{1,4}, Чумаков Р.Г.⁶, Кузнецова Т.В.^{1,7}

¹ИФМ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

³ИФП СО РАН, Новосибирск, Россия

⁴ЦКП "СКИФ", Новосибирск, Россия

⁵ИГМ СО РАН, Новосибирск, Россия

⁶НИИ Курчатовский институт, Москва, Россия

⁷Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

e-mail: danil.belyaev08@gmail.com, тел.: 8 (999) 5638972

Трехмерные топологические изоляторы обладают топологически защищенными поверхностными состояниями в виде конуса Дирака и имеют фиксированный спин носителей заряда [1,2]. Сильное спин-орбитальное взаимодействие в данном случае приводит к инверсии зон в объеме, при этом валентная зона и зона проводимости пересекаются в точке Дирака на поверхности материала, что приводит к появлению проводящих поверхностных состояний, которые защищены симметрией обращения времени. Открытие щели в точке Дирака, вызванное нарушением симметрии обращения времени путем приложения магнитного поля, может привести к появлению квантованного аномального эффекта Холла [3], магнитооптического эффекта [4]. Внесение магнитных легирующих примесей (Co, Mn, Cr) в бинарные топологические изоляторы (Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3) создает внутреннее магнитное поле, которое способно нарушить симметрию обращения времени.

В данной работе были синтезированы монокристаллы $\text{Bi}_{1.8}\text{Mn}_{0.1}\text{In}_{0.1}\text{Se}_3$ и $\text{Bi}_{1.8}\text{Co}_{0.1}\text{In}_{0.1}\text{Se}_3$ вертикальным методом Бриджмена. Фазовая и структурная чистота образцов были определена методом порошковой рентгеновской дифракции. Электронная структура соединений исследована методами XPS и ARPES в том числе с использованием синхротронного источника излучения. На основе серии фотоэмиссионных спектров, полученных при разных энергиях падающих фотонов, методом статистического байесовского вывода с учетом известных сечений фотонионизации валентных электронных состояний ионов была выполнена реконструкция доминирующих валентных парциальных плотностей электронных состояний для соединений $\text{Bi}_{1.8}\text{Mn}_{0.1}\text{In}_{0.1}\text{Se}_3$ и $\text{Bi}_{1.8}\text{Co}_{0.1}\text{In}_{0.1}\text{Se}_3$.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФ № 23-72-00067.

1. Hasan M. Z., Moore J. E. Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 2011.
2. Qi X. L., Zhang S. C. Rev. Mod. Phys. 2011. V. 83. P. 1057-1110.
3. Yu R. et al. Science. 2010. V. 329. P. 61-64.
4. Tse W. K., MacDonald A. H. Phys. Rev. Lett. 2010. V. 105. P. 057401.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ДВУМЕРНЫХ КАРБИДОВ ТИТАНА (MXENES)

Березкина А.Е.¹, Аверкиев И.К.²

¹Удмуртский государственный университет, г. Ижевск, Россия

²Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН, г. Ижевск, Россия

e-mail: averkiev1997@mail.ru, тел: 8 (341) 2430163

MXenes – это класс двумерных карбидов, карбонитридов и нитридов переходных металлов, которые имеют гексагональную кристаллическую решетку с общей формулой $M_nX_{n-1}T_x$ (где M – переходный d -элемент, X – атом углерода или азота, T_x – функциональные группы –F, =O, –OH и др.). MXenes являются перспективными материалами для широкого спектра применений. Свойства двумерных карбидов заметно отличаются от их объемных аналогов, что предоставляет возможность их широкого использования в ряде практического применения: от электрохимического хранения энергии до очистки загрязнений из окружающей среды [1]. Однако несмотря на широкое применение остается вопрос о создании эффективной и безопасной методики получения двумерных карбидов титана и исследовании их физико-химических свойств [2], которые в дальнейшем могли бы применяться в различных областях науки и техники. Поэтому поиск и создание методов синтеза двумерных карбидов и нитридов переходных металлов является актуальной задачей.

Проведены работы по синтезу двумерных карбидов титана (Ti_2C , Ti_3C_2). В качестве прекурсоров для синтеза MXenes использовали порошки Ti_2AlC и Ti_3AlC_2 . Травление алюминия проводили в смеси неорганических кислот (HCL, HF) с последующей промывкой в дистиллированной воде до нейтральной среды (pH = 6-7). При расслоении использовали хлорид лития и DMSO (диметилсульфоксид). В результате были получены водные коллоидные растворы двумерных карбидов титана темно-зеленого цвета.

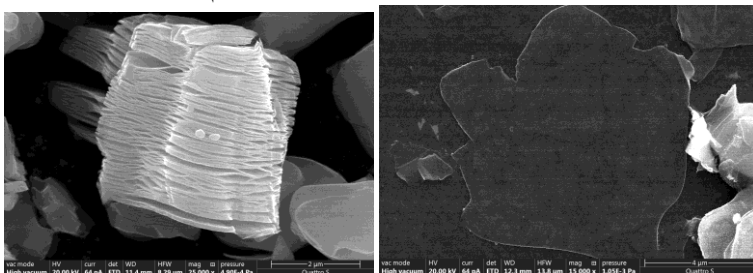


Рис. 1 Синтезированные двумерные карбиды титана Ti_2C , Ti_3C_2

Аттестацию полученных двумерных карбидов титана Ti_2C , Ti_3C_2 (рис. 1) проводили с помощью методов СЭМ (сканирующая электронная микроскопия), РФА (рентгенофазовый анализ) и АСМ (атомно-силовая микроскопия). Были определены размеры отдельных чешуек (от 5 до 8 мкм) и их толщина ($1,8 \pm 0,3$ нм).

В результате данной работы было показано, синтез двумерных карбидов титана можно реализовать в лабораторных условиях без применения дорогостоящего оборудования. При этом необходимо тщательно контролировать концентрацию неорганических кислот, соблюдать температурный и временной режим. Определен эффективный расслаивающий реагент – хлорид лития, который обеспечивает максимальное расслоение.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ №1022040600207-2. Исследования проводились в центре коллективного пользования «Поверхность и новые материалы» УдмФИЦ УрО РАН.

1. Rahman U. U. et al. *Molecules*, 2022, 27, 15, 4909.
2. Naguib M., Barsoum M. W., Gogotsi Y. *Advanced Materials*, 2021, 33, 39, 2103393.

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ И СОСТАВ ТОНКИХ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ И МАГНЕТРОННЫХ СЛОЕВ ОКСИДА ОЛОВА ПО ДАННЫМ СИНХРОТРОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Н.И. Бойков¹, С.С. Титова¹, О.А. Чувенкова¹, С.В. Рябцев¹, Е.В. Паринаова¹, Р.Г. Чумаков², А.М. Лебедев², К.А. Фатеев¹, С.Ю. Турищев¹

¹*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

²*Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт",
Москва, Россия*

e-mail: boykov-hfmm@bk., тел.: 8 (920) 4362260

Материалы системы олово-кислород и тонкопленочные структуры на их основе являются современными и актуальными для создания широкого ряда электронных приборов. Управление свойствами при формировании таких материалов и структур является важным вызовом при варьировании технологических режимов. Исследования синхротронными методами спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES – X-ray absorption near edge structure) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопией (XPS – X-ray photoelectron spectroscopy) позволяют без разрушения получить высокоточные экспериментальные данные о специфике локального атомного окружения и зарядовом состоянии атомов на поверхности изучаемого объекта, соответственно. Тем самым, изучить особенности состава, физико-химического состояния поверхности и доступных границ раздела, что является очень востребованным при управлении свойствами тонких слоев системы олово-кислород.

В работе исследованы тонкие слои оксидов олова, полученных современными методами молекулярно-лучевой эпитаксии и магнетронного распыления. В случае эпитаксии 5 монослоев олова (~1.6 нм) из эффузионной ячейки осаждались на подложки Si (001) с буферным слоем Si толщиной 50 нм. Слои олова толщиной 30 нм были получены магнетронным распылением на постоянном токе оловянной мишени в плазме аргона на подложки Si (100). XANES и XPS исследования были выполнены на канале RBL синхротрона BESSY II Гельмгольц Центра Берлин (Берлин, Германия) и канале НАОФЭС синхротрона "Курчатов" НИЦ "Курчатовский институт" (Москва, Россия).

Данные XPS показали, что при использовании метода магнетронного распыления для формирования 30 нм слоя Sn с последующим хранением в лабораторных условиях образуется однофазная поверхность естественного оксида олова SnO₂-x. Слой олова сформированный методом молекулярно-лучевой эпитаксии, после хранения такой же длительности в лабораторных условиях, полностью окисляется до SnO₂. Поверхность буферного слоя кремния подвергается окислению атомами атмосферного кислорода в результате их диффузии через эпитаксиальный слой олова.

Данные XANES показали, что на поверхности исследуемых образцов присутствуют оксиды схожие с оксидами на поверхности оловянной фольги, но отличные от диоксида олова тетрагональной модификации. Слои, полученные методом молекулярно-лучевой эпитаксии, полностью окислены с включениями фаз

промежуточных оксидов. Таким образом, тонкие слои олова при окислении от поверхности проходят одни и те же стадии образования оксидов независимо от метода получения этих слоев. В то же время результат взаимодействия с атмосферным кислородом существенно зависит от толщины сформированного нанослоя как показатель количества доступного для окисления металлического олова.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского Научного Фонда в рамках научного проекта № 23-22-00465.

ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ БИНАРНЫХ АССОЦИАТОВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК Ag_2S И PbS , ПАССИВИРОВАННЫХ ТИАКАРБОНОВЫМИ КИСЛОТАМИ

Смирнов М.С.¹, Возгорькова Е.А.¹, Бондарева Е.С.¹

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
e-mail: kate_01@bk.ru, тел.: 8 (910) 344-50-13

Повышенное внимание к разного рода ассоциатам с участием квантовых точек (КТ) обусловлено возможностью создания на их основе разнообразных фотонных устройств – фотодетекторов, люминесцентных сенсоров, биомаркеров, биочипов, устройств преобразования солнечной энергии и т.д. [1,2]. Принцип работы подобных устройств базируется на процессах переноса электронного возбуждения между компонентами ассоциата. Резонансный перенос энергии, в частности, многократно продемонстрирован на примере взаимодействия КТ и молекул красителей [3]. Ассоциатам двух полупроводниковых КТ посвящено меньшее число работ, в которых показан как перенос энергии, так и перенос зарядов между двумя КТ. При этом возможность управления оптическими свойствами КТ за счет квантово-размерного эффекта делает их перспективными для описанных выше устройств. Расширение номенклатуры бинарных соединений, в которых взаимодействие приводит к возникновению новых люминесцентных и транспортных свойств, на данном этапе развития фотонных технологий крайне актуально.

В данной работе сообщаем, что при смешивании коллоидных растворов КТ Ag_2S , покрытых тиогликолевой кислотой (Ag_2S_{TGA}) и КТ PbS , покрытых 2-меркаптопропионовой кислотой (PbS_{2-MPA}), за счёт самоорганизации происходит сборка КТ в бинарные ассоциаты. Это подтверждается как результатами ПЭМ высокого разрешения (рис. 1а), так и спектрально.

Основная экспериментальная закономерность, обнаруженная в люминесценции – разгорание свечения в полосе КТ Ag_2S_{TGA} при 900 нм и тушение в полосе КТ PbS_{2-MPA} при 1100 нм (рис. 1б). По мере роста концентрации C_{Ag_2S} в ассоциате тушение люминесценции КТ PbS_{2-MPA} происходит монотонно, зависимость интенсивности люминесценции в полосе, относимой к КТ Ag_2S_{TGA} имеет немонотонный характер – при соотношении концентраций КТ $C_{Ag_2S}:C_{PbS} = 1:3$ наблюдается наибольшее усиление интенсивности люминесценции в полосе 900 нм.

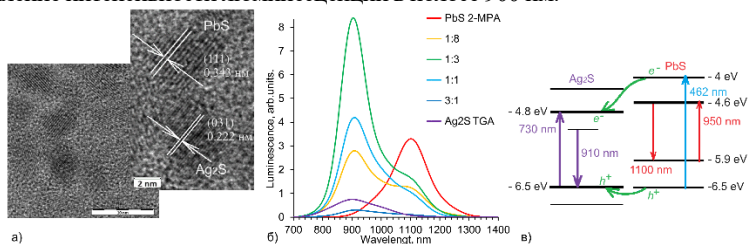


Рисунок 1. а) изображение HR ПЭМ; б) спектры фотолюминесценции КТ Ag_2S_{TGA} , PbS_{2-MPA} , а также их бинарных смесей в различных соотношениях

концентраций; в) схема возникновения люминесценции в ассоциате КТ $\text{Ag}_2\text{S}_{\text{TGA}}/\text{PbS}_{2\text{-MPA}}$.

Установленная закономерность свидетельствует в пользу обмена электронными возбуждениями между компонентами исследуемых смесей. Это предположение подтверждается также время-разрешённым исследованием люминесценции бинарных смесей КТ $\text{Ag}_2\text{S}_{\text{TGA}}$ и $\text{PbS}_{2\text{-MPA}}$ – с увеличением концентрации $\text{C}_{\text{Ag}_2\text{S}}$ в смеси наблюдали ускорение кинетики затухания люминесценции КТ $\text{PbS}_{2\text{-MPA}}$ в полосе 1100 нм. Однако спектр люминесценции донора возбуждений (КТ $\text{PbS}_{2\text{-MPA}}$) расположен в более длинноволновой области, чем спектр поглощения акцептора (КТ $\text{Ag}_2\text{S}_{\text{TGA}}$). В таком случае перенос энергии по Ферстеру невозможен. Единственным путём обмена возбуждениями в бинарном ассоциате такого типа может быть только фотоперенос носителей заряда.

Схема взаимного расположения уровней КТ $\text{Ag}_2\text{S}_{\text{TGA}}$ и КТ $\text{PbS}_{2\text{-MPA}}$ (рис. 1в) показывает, что после возбуждения КТ $\text{PbS}_{2\text{-MPA}}$ под действием излучения с длиной волны 462 нм рождается “горячий” экситон, т.е. электрон и дырка находятся на возбуждённых уровнях размерного квантования. В таком случае, для обоих носителей заряда не возникает препятствий при их переходе из КТ $\text{PbS}_{2\text{-MPA}}$ в КТ $\text{Ag}_2\text{S}_{\text{TGA}}$. В результате такого процесса будет наблюдаться люминесценция КТ $\text{Ag}_2\text{S}_{\text{TGA}}$, что мы и видим в эксперименте. Описанный механизм люминесценции бинарного ассоциата КТ $\text{Ag}_2\text{S}_{\text{TGA}}/\text{PbS}_{2\text{-MPA}}$ подтверждается также отсутствием в спектре люминесценции смесей полосы 900 нм с одновременным сохранением полосы 1100 нм при возбуждении излучением с длиной волны 808 нм, т.е. в условиях, когда энергии возбуждения экситона в КТ $\text{PbS}_{2\text{-MPA}}$ недостаточно для перехода носителей заряда на соответствующие уровни КТ $\text{Ag}_2\text{S}_{\text{TGA}}$.

Таким образом, подтверждено формирование бинарных ассоциатов КТ $\text{Ag}_2\text{S}_{\text{TGA}}$ и $\text{PbS}_{2\text{-MPA}}$. Спектральные проявления ассоциации объяснены в рамках модели, основанной на фотостимулированном переносе носителей заряда из горячего экситонного состояния КТ $\text{PbS}_{2\text{-MPA}}$ на состояния проводимости КТ $\text{Ag}_2\text{S}_{\text{TGA}}$.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 22-12-00232).

1. Guanghai Li [et.al.] Coordination Chemistry Reviews, 2023, 478, 214966.
2. Younghoon Kim [et.al.] J. of Materials Science & Technology, 2023, 147, 224-240.
3. T. S. Kondratenko [et.al.] J. of Fluorescence, 2020, 30, 3, 581-589.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛ-ДОПИРОВАННЫХ КЛАСТЕРОВ ОЛОВА КОМБИНИРОВАННЫМ МЕТОДОМ КОМПЬЮТЕРНОГО DFT-ЭКСПЕРИМЕНТА И ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Борщ Н.А.¹, Переславцева Н.С.², Максимова Е.И.²

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

e-mail: n.a.borshch@ya.ru, тел.: 8 (473) 2208363

Среди атомных кластеров особый интерес представляют «магические» кластеры, то есть кластеры, обладающие высокой стабильностью. Определение их пространственной структуры и электронных свойств является крайне важной задачей, поскольку понимание закономерностей их формирования и электронного строения является начальным этапом прогностических исследований новых функциональных материалов.

Одним из видов таких кластеров являются так называемые станнасферены, то есть кластеры из атомов олова, имеющие структуру, близкую к сферической. Кластер Sn_{12}^{2-} является так называемым «суператомом», т.е. сверхстойчивым кластером с высокосимметричной структурой икосаэдра [1]. Помещая в центр этого икосаэдра атом металла можно получить серию кластеров MeSn_{12} . Изменяя сорт атома металла можно влиять на структуру и электронные свойства кластеров. Известны исследования по синтезу моноанионных кластеров MeSn_{12}^{-} (Me – переходные и благородные металлы), в которых приводятся также данные по их фотоэлектронной спектроскопии [2]. Однако структура этих кластеров экспериментально не была определена. При этом очевидно, что эффективные работы по синтезу новых наноразмерных материалов невозможны без информации об атомной структуре кластеров олова.

Высокосимметричная структура станнасферена Sn_{12}^{2-} объясняется в рамках концепции «суператомов», то есть кластеров, молекулярные оболочки которых полностью заполнены, аналогично валентным оболочкам благородных газов. Допирование атомами металлов изменяет число валентных электронов в кластере, заполнение молекулярных оболочек изменяется, и структура основных изомеров металл-допированных кластеров может отличаться от икосаэдрической.

В работе представлены результаты расчета атомной структуры и электронных спектров стабильных изомеров кластеров MeSn_{12}^{-} (Me = Nb, Ta). Для каждого изомера рассчитан спектр плотности электронных состояний, сопоставление которого с экспериментальным фотоэлектронным спектром [2] позволило установить, какие именно структуры могут быть детектированы экспериментально. Такой способ определения реальных структур кластеров неоднократно апробирован и хорошо себя зарекомендовал для определения структуры кластеров на основе кремния или германия [3-5].

Расчеты проводились в рамках теории функционала плотности с использованием ВЗРW91-функционала [7, 8] и базисов def2-SVP для катионов и def2-SVPD для анионов [9]. Для расчетов использовался пакет программ Gaussian 09 [10].

Поиск стабильных изомеров кластеров основывался на идее, что моноанионные кластеры MeSn_{12}^- ($\text{Me} = \text{Nb}, \text{Ta}$) содержат $4n+6$ валентных электронов (n – число атомов олова в кластере), поэтому их стабильные структуры могут формироваться аналогично тому, как формируются *arachno*-структуры боранов и карборанов [10, 11], т.е. удалением двух вершин из *closo*-структур, содержащих $4n+2$ валентных электрона. Аналогом *closo*-многогранников для кластеров MeSn_n^- ($\text{Me} = \text{Nb}, \text{Ta}$) являются трикатионные кластеры MeSn_n^{3+} , поскольку они содержат $4n+2$ валентных электрона. Можно предположить, что стабильные изомеры кластера MeSn_{12}^- можно получить, удалив две вершины из кластера MeSn_{14}^{3+} . Поэтому сначала были рассчитаны стабильные структуры кластера MeSn_{14}^{3+} , а затем удалением двух вершин у них и дальнейшей оптимизацией получены стабильные структуры изомеров кластера MeSn_{12}^- .

Для кластеров MeSn_{14}^{3+} было получено два стабильных изомера (рис. 1). Изомер 14c-APR представляет собой шестиугольную антипризму с двумя дополнительными атомами олова, по одному над каждым из оснований. Изомер 14c-PR построен аналогично – это искаженная шестиугольная призма с дополнительными атомами олова над основаниями. Стабильные изомеры кластеров MeSn_{12}^- 12a-APR1, 12a-APR2 и 12a-APR3 получились удалением двух вершин из *closo*-структуры 14c-APR, а изомеры 12a-PR1, 12a-PR2 – из *closo*-структуры 14c-PR (рис. 1). Основным изомером является изомер 12a-APR1. Средние энергии связи в изомерах 12a-APR2 и 12a-APR3 незначительно меньше. Наименьшая средняя энергия связи соответствует призматической структуре, и она радикально меньше, чем в остальных изомерах. Основываясь на сопоставлении рассчитанных и экспериментального спектров [2], а также соотношении средних энергий связи в изомерах, можно утверждать, что экспериментально могли быть детектированы оба изомера – 12a-APR1 и 12a-APR2. Кроме того, нельзя исключать возможность наблюдения изомера 12a-APR3.

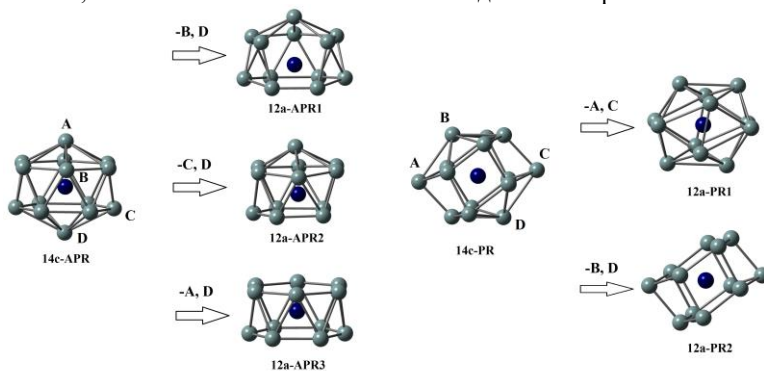


Рис. 1. Атомные структуры и схема формирования стабильных изомеров кластера MeSn_{12}^- ($\text{Me} = \text{Nb}, \text{Ta}$). Черным цветом показан металл, серым – атомы олова. Связи Me-Sn не показаны для упрощения рисунка.

Расчет подтвердил гипотезу о том, что стабильные изомеры моноанионных кластеров олова могут формироваться по тому же правилу, которое было сформулировано Уэйдом и Мингосом для боранов и карборанов [11, 12]. Стабильные *closo*- и *arachno*-структуры при этом могут отличаться от полученных для соединений бора.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках соглашения N 075-15-2021-1351.

1. Cui L.-F., J. Am. Chem. Soc., 2006, 128, 26, 8390-8391.
2. Cui L.-F., Wang L.-S., International Reviews in Physical Chemistry, 2008, 27, 1, 139-166.
3. Курганский С.И., Борщ Н.А., Физика и техника полупроводников, 2004, 38, 5, 580-584.
4. Борщ Н.А., Курганский С.И., Журнал неорганической химии, 2018, 63, 8, 1028-1035.
5. Борщ Н.А., Курганский С.И., Неорганические материалы, 2015, 51, 9, 946-952.
6. Борщ Н.А., Курганский С.И., Неорганические материалы, 2018, 54, 1, 3-10.
7. Becke A.D., J. Chem. Phys., 1993, 98, 5648-5652.
8. Andrae D. et al., Theoret. Chim. Acta, 1990, 77, 123-141.
9. Weigend F., Ahlrichs R., Phys. Chem. Chem. Phys., 2005, 7, 3297-3410.
10. Gaussian 09, Revision D.01, M. J. Frisch et al, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2013.
11. Wade K., J. Chem. Soc. D, 1971, 792-793.
12. Mingos D. A., Nature Physical Science, 1972, 236, 99-102.

Электронное строение перспективных наноклеточных термоэлектриков системы Ва-Cd-Si

Борщ Н.А.¹, Переславцева Н.С.², Радина В.Р.¹

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

e-mail: n.a.borshch@ya.ru, тел.: 8 (473) 2208363

Получение термоэлектрических материалов с оптимальными характеристиками является одной из актуальных задач современной науки. В 90-х годах прошлого века появилась гипотеза о том, что высокоэффективные термоэлектрические материалы могут быть получены на основе соединений, в которых слабо связанные атомы колеблются в ограниченном объеме [1]. В настоящее время наиболее перспективными с этой точки зрения являются так называемые клатратные кристаллы на основе элементов IV группы – кремния, германия и олова. Элементарная ячейка этих кристаллов строится из сфероидальных кластеров Si, Ge или Sn, внутри которых интеркалирован атом, стабилизирующий сфероид. Благодаря такой специфической структуре появляется возможность модифицировать свойства клатратных кристаллов, изменяя сорт интеркалированного атома и/или замещая часть атомов клатратной подрешетки атомами другого сорта [2, 3].

В данной работе представлены результаты расчета электронной структуры ряда Cd-замещенных клатратов на основе кремния – $\text{Ba}_8\text{Cd}_6\text{Si}_{40}$, $\text{Ba}_8\text{Cd}_7\text{Si}_{39}$ и $\text{Ba}_8\text{Cd}_8\text{Si}_{38}$. Клатрат $\text{Ba}_8\text{Cd}_7\text{Si}_{39}$ впервые был синтезирован в 2009 году [4], и его электронная структура не изучена ни экспериментально, ни теоретически. Представлены также результаты расчета электронной структуры клатратов $\text{Ba}_8\text{Cd}_6\text{Si}_{40}$ и $\text{Ba}_8\text{Cd}_8\text{Si}_{38}$, что позволило проанализировать влияние количества замещающих атомов Cd на электронно-энергетический спектр клатратов. Кроме того, для клатратов $\text{Ba}_8\text{Cd}_7\text{Si}_{39}$ и $\text{Ba}_8\text{Cd}_8\text{Si}_{38}$ были рассмотрены случаи с различным положением замещающих атомов в элементарной ячейке, и на этой основе изучено влияние кристаллографической позиции замещающего атома на электронные свойства кристалла.

Расчет электронной структуры клатратов проводился методом линеаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ) [5] в рамках локального приближении функционала плотности с использованием обменно-корреляционного потенциала [6].

В низкоэнергетической части валентной зоны Cd-замещенных кремниевых клатратов доминирует вклад Si 3s- и Cd 4d-состояний, а при более высоких энергиях преобладают Si 3p-состояния с заметным вкладом Cd 5s- и Cd 5p-состояний. Количество замещающих атомов кадмия влияет на электронно-энергетический спектр в прифермиевской области клатрата и определяет характер проводимости кристалла. Структура энергетических зон на уровне Ферми указывает на то, что Cd6-замещенный клатрат имеет металлический характер проводимости, а Cd7- и Cd8-замещенные являются полуметаллами.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках соглашения N 075-15-2021-1351.

1. Slack G.A., MRS Proceedings, 1997, 478, 47-54.
2. Курганский С.И., Борщ Н.А., Переславцева Н. С., Физика и техника полупроводников, 2005, 39, 10, 1218-1223.
3. Борщ Н. А., Переславцева Н. С., Курганский С. И., Физика и техника полупроводников, 2011, 45, 6, 729-739.
4. Li Y., Chi J., Gou W., Khandekar S., Ross Jr. J.H., *J. Phys.: Condens. Matter*, 2003, 15, 5535-5542.
5. Koelling D.D., Arbman G.O., *J. Phys. F*. 1975, 5, 2041-2054.
6. Vosko S.N., Wilk L., Nusair M., *Can. J. Phys.* 1980. V. 58. P. 1200-1211.

ГАЗОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ОТДЕЛЬНЫХ НАНОНИТЕЙ SnO₂ И ЗОЛЬ–ГЕЛЬ НАНОКОМПОЗИТОВ SnO₂

Шапошник А.В.¹, Звягин А. А.¹, Брежнев Н.Ю.², Турищев С.Ю.², Чувенкова
О.А.², Арефьева О.А.¹, Рябцев С.В.²

¹ Воронежский Государственный Аграрный университет, ул. Мичурина, 1,
Воронеж, РФ

² Воронежский Государственный университет, Университетская пл., 1,
Воронеж, РФ

Полупроводниковые материалы на основе оксидов металлов обладают интересными каталитическими свойствами, и могут находить применение в качестве газочувствительных сенсоров с высокой степенью стабильности и чувствительности, а также селективностью по отношению к конкретным газам. Данная работа состояла в сравнении газочувствительных свойств двух различных видов диоксида олова — это нанокompозит SnO₂, полученный золь-гель методом, и оксид олова в виде отдельных нанонитей. Подобное сравнение может быть достаточно интересным, поскольку на текущий момент существует тенденция к поиску новых материалов в виде нанонитей.

В рамках данной работы были синтезированы как образцы нанопорошка (при помощи золь-гель метода), так и нанонитей SnO₂ (при помощи газотранспортного метода) (рис.1а). Структура полученных форм была подтверждена рентгеновским фазовым анализом. Внешний вид образцов нанопорошка и нанонитей был определен при помощи сканирующей электронной микроскопии (рис.1б, 1в).

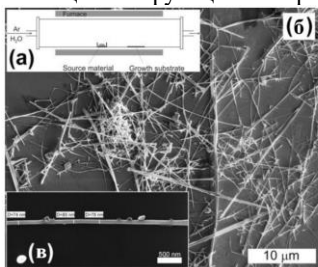


Рис.1. Схема синтеза нанонитей (а), вид нанонитей после синтеза (б), и отдельной нанонити (в) при помощи электронной микроскопии.

На основе полученных материалов были созданы образцы сенсоров, и проведено сравнение их чувствительности применительно к NH₃.

По итогам сравнения оказалось, что сенсоры на основе нанопорошка на настоящее время более чувствительны, а также более удобны для производства, чем их аналоги на основе нанонитей, однако последние имеют некоторые преимущества: это высокая стабильность (по причине монокристалличности), и возможность сокращения потребления энергии прибора.

*Работа выполнена при поддержке гранта
Российского научного фонда (проект № 23-23-00329).*

ФОРМИРОВАНИЕ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ В НАНОРАЗМЕРНЫХ МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ Mo/V₄C

Бугаев А.В.¹, Сахоненков С.С.¹, Шапошников Р. А.², Полковников В. Н.²,
Филатова Е. О.¹

¹ Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

² Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия
e-mail: bugaev.sasha99@mail.ru, тел.: 8 (968) 1858807

В настоящее время ведутся обширные исследования слоистых структур Mo/V₄C для различных применений, таких как термоядерные технологии, ВЕUV-литография, монохроматизация и управление пучками синхротронного рентгеновского излучения. Ожидается, что многослойные системы на основе бора будут превосходить в качестве рентгеновских зеркал для почти нормального падения пучка на длине волны около 6,6-6,7 нм, которая находится чуть выше К края поглощения бора.

Для реализации оптической схемы монохроматоров для источника синхротронного излучения необходимо одновременно обеспечить высокую спектральную селективность и высокие значения коэффициента отражения используемых структур. Кроме того, из-за высоких тепловых нагрузок на оптические элементы монохроматора необходимо также обеспечить термическую стабильность их отражательных характеристик. Многослойная структура Mo/V₄C представляется оптимальной для удовлетворения всех указанных требований. Особое внимание следует уделить оптимизации параметра Γ , который определяет отношение толщины молибдена к толщине периода структуры, чтобы достичь желаемой полосы пропускания.

Несмотря на более высокие эксплуатационные характеристики, многослойные структуры на основе V₄C всё ещё далеки от идеала. Многие исследования подчёркивают важность понимания процессов взаимодействия слоёв молибдена и карбида бора [1]. Важно подчеркнуть, что, хотя многослойные системы Mo/V₄C обладают большими перспективами, изучение их физико-химических свойств, особенно процессов, происходящих в межслоевых областях в процессе синтеза, всё ещё находится на ранних стадиях.

Точное определение химического состава границы раздела является сложной задачей из-за противоречивых позиций, представленных в литературе относительно фотоэлектронных пиков MoV_x [2] и MoV_xC_y [3]. Другое противоречие вызвано непониманием смешивания слоёв молибдена и карбида бора: во многих работах предполагается сохранение слоя карбида бора в системе. Именно поэтому в данной работе было тщательно изучено формирование границы раздела в зависимости от значения периода и параметра Γ , а также способов ограничения смешивания молибдена и карбида бора путем введения барьерного слоя W. Был реализован комплексный подход к исследованию структур Si/[Mo/V₄C/W] с различными периодами (от 1,8 нм до 3,4 нм) при одинаковом $\Gamma \approx 0,46$ и значениях Γ (от 0,24 до

0,46), используя рентгеновскую фотоэлектронную спектроскопию в сочетании с рентгеновской рефлектометрией и рентгеновской дифракцией.

Впервые показано, что W_4C подвергается полному превращению в образовавшееся соединение, в то время как Mo подвергается лишь частичному переходу. Полученные структуры могут быть представлены в виде $Si/[Mo/MoW_xC_y]_n$. Было установлено, что независимо от значения Γ (в диапазоне от 0,24 до 0,46) весь W_4C превращался в MoW_xC_y : даже в системе с наименьшим значением Γ чистый материал W_4C по-прежнему не обнаруживался, но наблюдался чистый молибден.

При нанесении тонкого барьерного слоя вольфрама (толщиной 0,3 нм) на поверхность раздела Mo-на- W_4C мы наблюдали взаимодействие слоя W с W_4C с образованием Wb_xC_y [4]. Это взаимодействие привело лишь к незначительному снижению содержания компонента MoW_xC_y . Взаимодействия Mo и W не наблюдалось. Можно сделать вывод, что реализации только технологии тонкого барьерного слоя недостаточно.

Кроме того, на основе данных, полученных методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, были разработаны теоретические модели, которые в дальнейшем впервые были применены к рефлектометрическим данным, полученным для трех различных длин волн. Разработанный подход продемонстрировал, что построение модели на основе данных рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии может предоставить дополнительную информацию, тем самым ограничивая набор решений обратной задачи рефлектометрии. Таким образом данный подход является эффективным при решении обратной задачи рефлектометрии.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №19-72-20125-П. Авторы также выражают свою благодарность Междисциплинарным ресурсным Центрам СПбГУ по направлению "Физические методы исследования поверхности", "Рентгенодифракционные методы исследования" и НИЦ «Курчатовский институт» (Лабораторный модуль ЭСХА) за проведенные исследования.

1. A.F. Jankowski, P.L. Perry, Characterization of Mo/ W_4C multilayers, Thin Solid Films 206 (1991) 365–368.

2. Y. Ge, K. Bao, T. Ma, J. Zhang, C. Zhou, S. Ma, Q. Tao, P. Zhu, T. Cui, Revealing the Unusual Boron-Pinned Layered Substructure in Superconducting Hard Molybdenum Semiboride, ACS Omega 6 (2021) 21436.

3. P. Malinovskis, J. Palisaitis, P.O.Å. Persson, E. Lewin, U. Jansson, Synthesis and characterization of MoB_{2-x} thin films grown by nonreactive DC magnetron sputtering, Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films 34 (2016).

4. F. Zhao, L. Qiu, Z. Ding, Y. Li, B. Yao, W. Shen, Q. Li, P. Zhu, Synthesis and characterization of $Wb_2-Wb_3-W_4C$ hard composites, Int J Refract Metals Hard Mater 82 (2019) 268–272.

СОСТАВ И ПРОТЯЖЁННОСТЬ МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦ В МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ Ru/V₄C В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СООТНОШЕНИЯ ТОЛЩИН СЛОЁВ И ТЕМПЕРАТУРНОГО ОТЖИГА

Бугаев А.В.¹, Сахоненков С.С.¹, Полковников В. Н.², Филатова Е. О.¹

¹ Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

² Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия
e-mail: bugaev.sasha99@mail.ru, тел.: 8 (968) 1858807

В настоящее время метод экстремальной ультрафиолетовой литографии, основанный на использовании системы многослойных зеркал нормального падения для передачи изображения шаблона на поверхность кремниевой пластины, является наиболее перспективной основой для производства интегральных микросхем следующего поколения. Эффективность данного метода в значительной степени зависит от коэффициента отражения используемых многослойных зеркал. В частности, ожидается, что многослойные системы на основе карбида бора смогут обеспечить достаточно высокие значения коэффициента отражения, а также высокую спектральную селективность многослойных рентгеновских зеркал, произведённых на их основе.

Одной из оптимальных структур для использования в многослойных рентгеновских зеркалах является система Ru/V₄C. Она показывает высокий теоретический коэффициент отражения (67%) [1]. Однако ввиду недостаточного количества исследований внутреннего строения данной системы, многослойные рентгеновские зеркала Ru/V₄C ещё далеки от своего идеала. На практике как отражательная способность системы Ru/V₄C, так и спектральная селективность оказываются сильно ниже теоретических.

Основная проблема заключается во взаимодействии слоёв Ru и V₄C на их межфазной границе. В работе [2] отмечается сильное проникновение атомов Ru в слой V₄C. В результате такой диффузии происходит размытие границ и образование переходных слоёв. Данные процессы негативно сказываются на эксплуатационных характеристиках многослойной структуры.

Исходя из вышесказанного представляется важным изучение формирования межфазных границ в системе Ru/V₄C. В данной работе были рассмотрены многослойные системы Ru/V₄C с величиной периода $d=3.5$ нм и изучены состав и протяжённость переходных слоёв в зависимости от параметра Γ (отношение толщины слоя Ru к величине периода системы). Выявлено формирование переходного слоя Ru_xV_{4-y}C_y во всех образцах. При этом, с ростом параметра Γ наблюдается снижение доли переходного слоя по сравнению с долей чистого Ru. Помимо этого, важным свойством многослойных структур, использующихся в рентгеновских зеркалах, является термостойкость, поскольку элементы оптической системы могут сильно нагреваться в ходе работы, что может привести к деградации многослойной системы. Поэтому также был проведён температурный отжиг

системы Ru/B₄C при температуре 400°C. Анализ фотоэлектронных спектров, полученных от этой системы, показал сильный рост толщины переходного слоя RuB_xC_y в сравнении с аналогичной системой без отжига. Таким образом, были проведены исследования взаимодействия слоёв в многослойной системе Ru/B₄C, которые в дальнейшем могут быть полезными при проектировании многослойных рентгеновских зеркал, основанных на данной системе.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №19-72-20125-П. Авторы также выражают свою благодарность Институту Физики Микроструктур РАН за предоставленные образцы и Научному парку СПбГУ (Лабораторный модуль Escalab) за проведенные исследования.

1. Qiushi Huang et al., Nitridated Ru/B₄C multilayer mirrors with improved interface structure, zero stress, and enhanced hard X-ray reflectance, Optics Express 21804, vol. 26, № 17 (2018).

2. Yang Liu et al., Structure of Ru/B₄C multilayer for high flux monochromator application, Proc. of SPIE, vol. 9963 (2016).

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА АМОРФНЫХ ПЛЕНОК SiO_x С НАНОКЛАСТЕРАМИ КРЕМНИЯ МЕТОДОМ УЛЬТРАМЯГКОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Васильева Е. С.¹, Барков К. А.¹, Терехов В.А.¹, Теруков Е.И.², Ундалов Ю.К.², Трапезникова И.Н.², Ивков С.А.¹, Мониц Н.В.^{1,3}, Минаков Д.А.³, Попова Е.В.¹

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж

² ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург

³ ООО «Смарт Рэй», Воронеж

e-mail: barkov@phys.vsu.ru, тел.: 8 (473) 2208363

Нанокристаллы и нанокластеры кремния размером менее 8 нм проявляют способность к фотолуминесценции, а это открывает путь к созданию быстродейственных светоизлучающих и оптоэлектронных устройств [1,2]. В случае диэлектрических пленок, содержащих нанокластеры или нанокристаллы кремния одной из главных задач, является получение нанокристаллов кремния с низкой дисперсией по размеру и высокой концентрацией в пленке. Согласно работам [3,4] пленки SiO_x с нанокластерами аморфного кремния могут быть получены при PECVD, а используя модуляцию плазмы можно изменять как размеры, так и содержание нанокластеров кремния. Поэтому в настоящей работе было исследовано влияние временных характеристик плазмы dc-магнетрона при получении пленок $a\text{-SiO}_x + ncl\text{-Si}$ на их фазовый состав, а также оптические свойства.

В работе исследовались нанокластерные пленки $a\text{-SiO}_x + ncl\text{-Si}$ толщиной 400 нм, полученные в ФТИ им. А.Ф. Иоффе плазмохимическим осаждением из газовой фазы ($80\% \text{Ar} + 20\% \text{SiH}_4$) + O_2 , концентрация $\text{O}_2 \sim 21,5$ мол.%. В качестве подложки использовался кристаллический кремний КДБ-10. Температура подложки составляла 265°C . В процессе осаждения осуществлялась модуляция плазмы dc-магнетрона, которая заключалась в периодическом включении и выключении магнита магнетрона, с общим количеством циклов $n=180$. При этом длительность включенного состояния t_{on} и длительность выключенного состояния t_{off} магнетрона варьировалась от 5 до 15 с. Анализ фазового состава пленок SiO_x с нанокластерами кремния осуществлялся методом ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС). Изучение оптических свойств пленок проводилось по спектрам фотолуминесценции.

Результаты анализа фазового состава методом УМРЭС показывают, что пленки $a\text{-SiO}_x + ncl\text{-Si}$ представляют собой сложный композит. Все образцы содержат в своем составе фазы аморфного кремния $a\text{-Si}$, диоксида кремния SiO_2 , а также субоксида кремния $\text{SiO}_{1.7}$. При этом с увеличением длительности работы магнетрона t_{on} от 5 до 15 с содержание фазы аморфного кремния $a\text{-Si}$ в пленке SiO_x увеличивается от ~ 20 до ~ 40 %, что сопровождается уменьшением средней степени окисления субоксидной матрицы от $\text{SiO}_{1.9}$ до $\text{SiO}_{1.8}$.

В то же время содержание фазы аморфного кремния $a\text{-Si}$ в пленке SiO_x не сильно зависит от длительности выключенного состояния t_{off} магнетрона при получении

образцов. По данным УМРЭС содержание аморфного кремния в пленках SiO_x варьируется от 10 до 20% при изменении t_{off} от 5 до 15 с.

Таким образом, длительность включенного состояния t_{on} магнетрона оказывает более существенное влияние на формирование фазы аморфного кремния $a\text{-Si}$ в пленках SiO_x при плазмохимическом осаждении по сравнению с длительностью выключенного состояния t_{off} магнетрона.

В спектрах фотолуминесценции пленок SiO_x с нанокластерами кремния наблюдается фотолуминесценция при $h\nu \sim 2,3$ эВ, связанная с дефектами оксида кремния. Увеличение длительности работы магнетрона до 15 с приводит к появлению дополнительного максимума в спектре ФЛ при $h\nu \sim 2,1$ эВ связанного с нанокластерами кремния со средними размерами $\sim 2,5\text{-}3$ нм [2].

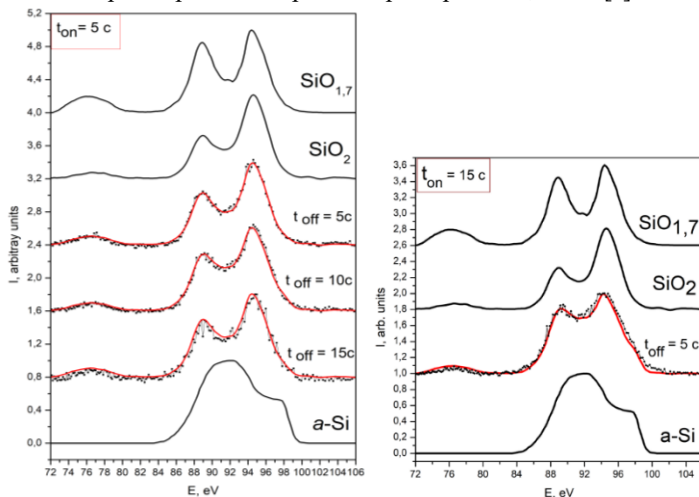


Рис. 1. Рентгеновские эмиссионные $\text{Si } L_{2,3}$ спектры пленок $a\text{-SiO}_x$ с нанокластерами кремния, полученных при различных временных характеристиках t_{on} и t_{off} dc-магнетрона, а также эталонные спектры аморфного кремния $a\text{-Si}$, диоксида кремния SiO_2 и субоксида кремния $\text{SiO}_{1,7}$. Глубина анализа 60 нм. Экспериментальные спектры представлены точками, смоделированные – красной линией.

1. Wang Y. Q. et al. Amorphous silicon nanoparticles in compound films grown on cold substrates for high-efficiency photoluminescence //Nanotechnology. 2003. V. 14. P. 1235.

2. Ledoux G. et al. Photoluminescence of size-separated silicon nanocrystals: Confirmation of quantum confinement //Applied Physics Letters. 2002. V. 80. P. 4834-4836.

3. Терехов В. А. и др. Состав и оптические свойства аморфных пленок $a\text{-SiO}_x$: Н с нанокластерами кремния //Физика и техника полупроводников. 2016. Т. 50. С. 212-217.

4. Ундалов И. К., Теруков Е. И., Трапезникова И. Н. Формирование ncl-Si в аморфной матрице $a\text{-SiO}_x$: Н, расположенной вблизи анода и на катоде, с помощью модулированной по времени DC-плазмы с $(\text{SiH}_4\text{-Ar-02})$ -газовой фазой ($\text{CO}_2 = 21.5$ мол%) //Физика и техника полупроводников. 2019. Т. 53. С. 1547-1556.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МОНОМЕТАЛЛИЧЕСКИХ АТОМНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ Pt ПО ДАНЫМ СПЕКТРОСКОПИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ МЕТОДАМИ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

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

¹ Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: viklenko@sfedu.ru, тел.: 8 (928) 1324399

В настоящее время методы машинного обучения интенсивно развиваются и находят свое применение, в том числе, в задачах физики конденсированного состояния. Эти методы представляются перспективными как в задачах моделирования материалов на атомном уровне, так и в задачах определения структуры вещества по экспериментальным данным [1,2].

В настоящей работе рассматривается применимость методов машинного обучения для получения информации о локальной атомной структуре металлических наночастиц Pt по данным спектроскопии рентгеновского поглощения в околопороговой области. В частности, рассматривается решение задачи получения основных характеристик радиальной функции распределения атомов, которые чувствительны к размеру и форме монометаллических наночастиц (НЧ), а также к распределению компонентов в биметаллических НЧ [3,4].

Предложены методы и подходы к генерации синтетических обучающих и тестовых данных, обеспечивающих высокую точность определения целевых характеристик. Получен ряд моделей машинного обучения, демонстрирующих высокую обобщающую способность в домене синтетических спектров рентгеновского поглощения, что указывает на надежность предложенных методов и подходов, и, в перспективе, может позволить выполнять анализ широкого класса спектров, включая экспериментальные.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 23-21-00526. <https://rscf.ru/project/23-21-00526/>. Выражаю особую благодарность Прядченко В.В. кандидату физ.-мат. наук за значимые замечания и важнейшие советы при проведении исследования.

1. Abramson J, Adler J, Dunger J, et al., Nature, 2024;630(8016):493-500. doi:10.1038/s41586-024-07487-w

2. Gilmer J, Schoenholz SS, Riley PF, Vinyals O, Dahl GE., Published online April 4, 2017. <http://arxiv.org/abs/1704.01212>

3. Гладченко-Джевелекис ЯН, Толчина ДБ, Срабионян ВВ, Дурьманов ВА, Авакян ЛА, Бугаев ЛА., Российские нанотехнологии, 2024;19(3):322-326. doi:10.56304/S199272232360109X

4. Timoshenko J, Lu D, Lin Y, Frenkel AI., J Phys Chem Lett., 2017;8(20):5091-5098. doi:10.1021/acs.jpcclett.7b02364

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ Ag_2S В НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНКАХ Ag-SiO_x , ПОЛУЧЕННЫХ ИОННО-ЛУЧЕВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ

С.И. Высокчина¹, К.А. Барков¹, Ю.Н. Власов², В.А. Терехов¹, С.А. Ивков¹, Н.С. Буйлов¹, А.К. Пелагина¹, Е.С. Керсновский¹, И.В. Польшин¹

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² Воронежский государственный университет инженерных технологий,
Москва, Россия

e-mail: barkov@phys.vsu.ru, тел.: 8 (980)3782313

Благодаря наличию прямых оптических переходов в ИК диапазоне наночастицы сульфида серебра является перспективным материалом для преобразования солнечной энергии [1]. При этом наиболее распространенным способом получения наночастиц Ag_2S является синтез в коллоидных растворах [2]. Однако интегрирование сульфида серебра в кремниевую технологию требует промышленных подходов к формированию массивов наночастиц Ag_2S . Одним из таких способов для твердотельной электроники является золь-гель метод формирования структуры композитных пленок SiO_2 , содержащих наночастицы Ag_2S [3]. В данной работе формирование массивов наночастиц Ag_2S в матрице диоксида кремния методом ионно-лучевого распыления с последующим отжигом в парах серы. Данный подход совместим с полупроводниковой технологией.

Исходные плёнки SiO_x с наночастицами Ag толщиной около 1,5 мкм были получены на подложке $\text{Si}(100)$ методом ионно-лучевого распыления составной мишени из чистого Ag (99.99%) и кремниевых навесок Si (КДБ-12). Осаждение плёнки осуществлялось в вакуумной камере (с уровнем остаточного давления 10^{-6} Торр), которая затем была заполнена Ag (чистота 99.992%) до общего давления газа $8 \cdot 10^{-4}$ Торр. Неэквидистантное расположение кремниевых навесок на поверхности серебряной мишени позволило получить нанокompозитные пленки Ag-SiO_x с различным содержанием серебра от 55 до 80 ат.%. При аналогичных условиях для отработки процесса сульфидизации серебра была получена пленка чистого Ag толщиной 1,5 мкм на кремниевой подложке. Отжиг плёнки чистого серебра и нанокompозитных плёнок Ag-SiO_x проводился в парах серы при температурах подложки от 150 до 400 °С.

Атомный состав пленки определялся на растровом электронном микроскопе (РЭМ) JEOL JSM-6380LV с приставкой для микроанализа INCA Energy 250 при энергии первичных электронов 5 кэВ. Анализ структуры образца проводился на дифрактометре ДРОН-4-07 с $\text{Cu } K_{\alpha,1,2}$ -излучением $\lambda=1,542 \text{ \AA}$. Морфология поверхности ионно-лучевых нанокompозитных плёнок $\text{Ag}_2\text{S-SiO}_x$ анализировалась с помощью сканирующего атомно-силового микроскопа Solver P47 NT-MDT (АСМ) в области сканирования $1 \times 1 \text{ мкм}^2$.

Фазовый состав пленки $\text{Ag}_{80}\text{Si}_{20}$ определялся с помощью уникальной методики ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС), реализованной на спектрометре РСМ-500. Данный метод позволяет регистрировать характеристическое рентгеновское $\text{Si } L_{2,3}$ излучение, возникающее в результате

переходов электронов из валентной зоны на остоновый Si 2p уровень. В результате метод УМРЭС дает информацию о плотности электронных состояний в валентной зоне. Возбуждение рентгеновских эмиссионных Si L_{2,3}-спектров осуществлялось электронным пучком с энергией от 1 до 3 кэВ, что обеспечивало глубину анализа от 10 до 60 нм.

Согласно данным АСМ микроскопии средние размеры наночастиц Ag в исходной нанокompозитной пленке Ag-SiO_x составляют около 30 нм и находятся в нанокристаллическом состоянии.

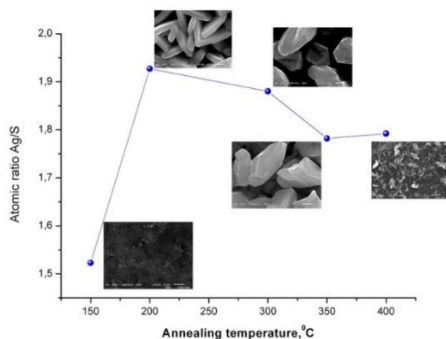


Рис. 1. Зависимость от температуры отжига в парах серы состава плёнок сульфидов, синтезированных из слоёв чистого серебра на подложке из кремния. На вставках приведены соответствующие РЭМ изображения, эталон длины представленный в виде белой полоски в нижнем правом углу каждого изображения составляет 0,5 мкм.

Результаты рентгеноструктурного анализа указывают на формирование фазы Ag₂S во всех пленках сульфидов вне зависимости от температуры отжига в парах серы. В то же время по данным микроанализа в плёнке, отожженной при минимальной температуре 150 °С, содержание серы составляет 23 ат.%, а соотношение компонент Ag/S составляет 1,5 и не соответствует стехиометрии фазы Ag₂S. При этом поверхность пленки сульфида достаточно гладкая, и характеризуется небольшой шероховатостью (Рис.1). Увеличение температуры отжига до 200 °С приводит к росту содержания серы в образце до ~33 ат.% и соотношение компонент Ag/S составляет ~1.93 и приближается к стехиометрии Ag₂S, а также происходит существенное изменение микроструктуры пленки с образованием. Дальнейшее увеличение температуры до 300 и 350 °С приводит к существенному увеличению размера гранул Ag₂S с одновременным уменьшением соотношения содержания элементов Ag/S до значения ~1.75

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10294, <https://rscf.ru/project/23-79-10294/>.

1. Mirahmadi F. S. et al., Solar Energy, 2020, 202, 155-163.
2. Perepelitsa A.S. et al., Journal of Luminescence, 2018, 198, 357.
3. Armelao L. et al., Journal of Materials Chemistry, 1999, 9, 2893-2898.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ДОЛИ АТОМОВ ПЛАТИНЫ В БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦАХ ТИПА ЯДРО- ОБОЛОЧКА В АНСАМБЛЕ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВАНИИ ИНФОРМАЦИИ О РАДИАЛЬНОМ РАСПРЕДЕЛЕНИИ АТОМОВ С ПОМОЩЬЮ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

Гладченко-Джевелекис Я.Н.¹, Авакян Л.А.¹, Срабионян В.В.¹, Беленов С.В.¹,
Дурыманов В.А.¹

¹ Южный Федеральный Университет, Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: ygl@sfnedu.ru, тел.: 8 (961) 4321092

Биметаллические наночастицы (НЧ) Pt-оболочка Cu-ядро являются перспективными катализаторами реакции восстановления кислорода с активностью, сравнимой с активностью монометаллических частиц Pt. В то же время частицы ядро-оболочка более дешевые по сравнению с чисто платиновыми частицами, а также обладают более высокой стабильностью в процессе реакции. Ещё большее повышение стабильности может быть достигнуто в так называемых «градиентных» наночастицах с плавным переходом компонентов в области границы раздела ядра и оболочки [1]. Однако, при синтезе допускается формирование наночастиц различных типов наряду с архитектурой ядро-оболочка, таких как неупорядоченный сплав и чисто-платиновые наночастицы.

Для установления доли наночастиц с заданной архитектурой применялась нейронная сеть – многослойный перцептрон, адаптированный к синтетическим данным – к парным радиальным функциям распределения атомов (ПРФРА). ПРФРА были получены в результате моделирования молекулярной динамики НЧ разного размера, состава и архитектуры. В результате работы нейросеть предсказывает долю атомов платины входящую в НЧ определенной архитектуры в ансамбле НЧ разных архитектур, размеров и концентраций. Это важный параметр для определения успешности стратегии синтеза и оптимизации расхода ценного металла – платины. Оценка качества предсказаний осуществлялась на модельных ПРФРА с помощью метрики прогнозирования R2 (коэффициент детерминации). Для приемлемых моделей предполагается, что коэффициент детерминации должен быть не меньше 50% (в этом случае коэффициент множественной корреляции превышает по модулю 70%). Модели с коэффициентом детерминации выше 80% можно признать достаточно хорошими (коэффициент корреляции превышает 90%).

Показано, что атомная доля платины, входящей в НЧ определенной архитектуры в ансамбле наночастиц, может быть определена с высокой точностью (R2 = 99%) при использовании полносвязной нейронной сети, состоящей из пяти линейных слоев.

При применении нейронной сети к экспериментальным ПРФРА, полученным в результате EXAFS анализа [2], были предсказаны значения, которые соответствуют ожидаемым величинам, в частности, для материала с ожидаемым строением типа сплав наибольшая доля атомов формирует сегрегированный твердый раствор, а для материала с ожидаемым строением Pt-оболочка Cu-ядро – ядро-оболочку. В обоих случаях нейронная сеть предсказывает наличие примеси чисто-платиновых наночастиц.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 23-21-00526.

1. Alekseenko A., Guterman V., Belenov S., et. al., Pt/C electrocatalysts based on the nanoparticles with the gradient structure, International Journal of Hydrogen Energy. 2018. Vol. 43. P. 3676.

2. Avakyan L., Tolchina D., Barkovski V. et. al., Ultimate Sensitivity of Radial Distribution Functions to Architecture of PtCu Bimetallic Nanoparticles, Comput. Mater. Sci. 2022 Vol. 208. P. 111326.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЛЕГИРОВАНИЯ ПЛЕНОК ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ ФОСФОРОМ ПО УЛЬТРАМЯГКИМ РЕНТГЕНОВСКИМ ЭМИССИОННЫМ СПЕКТРАМ

¹Горбунова А.Н., ¹Барков К.А., ¹Терехов В.А., ²Медведев Н.М., ²Скиданов А.А., ¹Ивков С.А., ¹Керсновский Е.С., ¹Польшин И.В.

*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
АО «ВЗПП-Микрон», Воронеж, Россия
e-mail: anastasia.g.5@mail.ru, тел.: 8 (920) 4425575*

Легирование поликристаллического кремния является важной технологической операцией в производстве современных полупроводниковых приборов. Однако, несмотря на широкое применение поликремния, остаются нерешенными вопросы, касающиеся оптимизации параметров легирования и оценки его эффективности в случае легирования высокими концентрациями примеси.

Исследуемые пленки поликристаллического кремния были получены методом химического осаждения из газовой фазы (CVD). Данный процесс осуществлялся в реакторе горизонтального типа с горячими стенками «Изотрон 4-150» при давлении (P=0,15 мм.рт.ст.) и температуре ~ 650 оС. Для исследования структуры пленок поликристаллического кремния и расчета размеров их кристаллических зерен использовался метод рентгеновской дифрактометрии (рентгенодифракционный анализ, XRD - X-ray diffractometry). Эффективность легирования пленок нанокристаллического кремния, а также особенность их электронного и атомного строения определялись с помощью метода ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС) на спектрометре РСМ-500. Для исследования электрических свойств пленок нанокристаллического кремния был использован четырехзондовый метод.

По данным рентгеновской дифракции и ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии диффузия фосфора при VPC13-30 л/ч в пленку поликремния приводит к укрупнению размеров зерен от 55 до 355 нм и появлению в рентгеновском эмиссионном Si L_{2,3}-спектре максимума интенсивности при E~100 эВ (вблизи потолка валентной зоны) с относительное интенсивностью I~0.06 отн.ед., что соответствует концентрации электрически активной примеси $\sim 1.05 \cdot 10^{20}$ см⁻³.

Отжиг пленки поликремния после диффузии при T=850 °С в течении 60 мин. приводит к увеличению интенсивности максимума при E=100 эВ до 0,08 отн.ед. и росту концентрации электрически активной примеси фосфора до $1.65 \cdot 10^{20}$ см⁻³, а также снижению удельного сопротивления от 154,02 до $3,2 \cdot 10^{-4}$ Ом*см.

Ионная имплантация фосфора в пленку поликремния приводит к аморфизации поверхностных слоев до 120 нм, которая сопровождается ростом интенсивности примесного максимума в рентгеновском Si L_{2,3}-спектре до 0,09 отн.ед., что обусловлено формированием примесной подзоны и дефектами в аморфном кремнии a-Si.

Отжиг пленки поликремния после ионной имплантации при различных температурах от 850 до 1000 °С приводит к восстановлению кристаллической

структуры и уменьшению интенсивности примесного максимума до 0,06 отн.ед. ($1,06 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$), что может быть обусловлено снижением количества дефектов. При этом в результате отжига удельное сопротивление пленки поликремния снижается от ~ 60 до $5,5 \cdot 10^{-4} \text{ Ом} \cdot \text{см}$

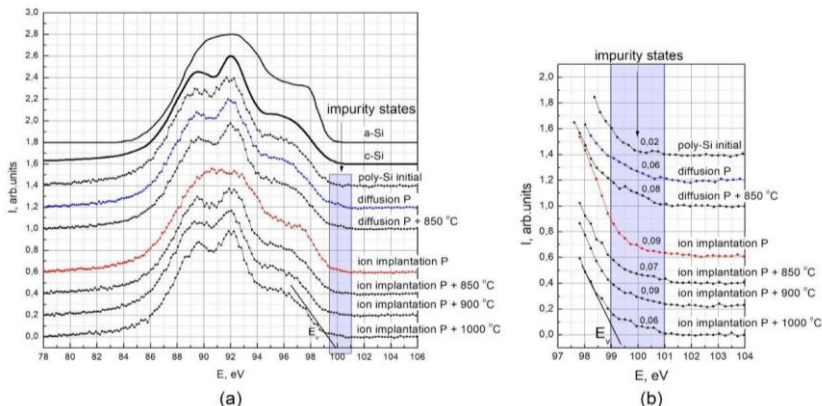


Рис.1 - Рентгеновские эмиссионные Si L_{2,3}-спектры пленок Poly-Si после диффузии и ионной имплантации фосфора, снятые на глубине анализа 60 нм, а также спектры эталонов кристаллического c-Si и аморфного a-Si кремния (а). Участки рентгеновских спектров в области примесных состояний вблизи потолка ВЗ пленок Poly-Si после диффузии и ионной имплантации фосфора, снятые на глубине анализа 60 нм с большим временем накопления (б).

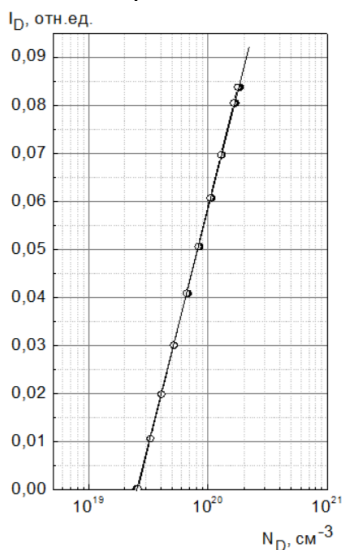


Рис.2 - Зависимость интенсивности примесного донорного уровня ND от концентрации примеси в монокристаллическом кремнии [1].

Способ определения концентрации электрически активной донорной примеси в поверхностных слоях кремния неразрушающим методом ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии. Терехов В.А., Барков К.А., Домашевская Э.П., Патент на изобретение, Номер патента: RU 2709687, Патентное ведомство: Россия, Год публикации: 2019, Номер заявки: 2019127171, Дата регистрации: 29.08.2019, Дата публикации: 19.12.2019.

ЭЛЕКТРОННО-МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ И РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМЕРНОГО КОМПОЗИТА

Грапенко О.Ю.¹, Власенко В.Г.¹, Гороховский А.В.², Горшков Н.В.²

¹Южный федеральный университет, Научно-исследовательский институт физики, Ростов-на-Дону, Россия

²Саратовский государственный технический университет им. Гагарина Ю.А.,

³Физико-технический институт, Саратов, Россия

e-mail: grapenko@sfedu.ru, тел.: +7(928)1531314

Новое поколение электронных устройств требует разработки гибких материалов с высокой диэлектрической проницаемостью для различных практических применений. Для удовлетворения этих потребностей полимерные материалы являются наиболее перспективными кандидатами, поскольку они просты в изготовлении, обладают высокой химической стабильностью, превосходной гибкостью, низкими диэлектрическими потерями и высокой прочностью на разрыв. Предпочтительным полимером для применения в качестве диэлектрика может являться поливинилиденфторид (ПВДФ), поскольку его диэлектрическая проницаемость ϵ' составляет около 10. Для улучшения диэлектрических свойств ПВДФ его модифицируют путем добавления различных добавок, в том числе, двумерных проводящих наноматериалов карбидов/нитридов переходных металлов, называемых MXenes. Химическая формула MXenes может быть представлена как $M_nX_nT_x$, где M - переходный металл (Ti, V, Zr, Nb, Mo, Cr и т.д.), X = C и/или N, T_x - поверхностные образования, определяемые методом синтеза (-F, -OH, -Cl и т.д.), n = 1-4. Благодаря своим превосходным свойствам MXenes демонстрируют широкий потенциал применения в различных областях, включая электрохимическое накопление энергии, фотокатализ, сенсорику, защиту от магнитных помех и многое другое.

Для получения полимерных нанокомпозитов ПВДФ/ V_2CT_x отслоенный d- V_2CT_x вводили в диметилформамид (ДМФ, C_3H_7NO) путем замены растворителя без сушки и обработки ультразвуком. Для этого водную суспензию d- V_2CT_x диспергировали в ПВДФ с последующим центрифугированием [1]. Целью настоящего исследования являлось изучение морфологии частиц композита и определение локального атомного строения ионов ванадия в матрице d- V_2CT_x .

Исследования морфологии и микроструктуры проводились на просвечивающем электронном микроскопе FEI Tecnai G2 Spirit Bio (Нидерланды). Съемка проводилась в режиме яркого поля при ускоряющем напряжении 120 кВ, линейное разрешение до 0.34 нм.

Рентгеновские V K-края поглощения были измерены с помощью лабораторного спектрометра R-XAS Rigaku. Излучение от рентгеновской трубки, работающей при напряжении 12 кВ и 60 мА, было монохроматизировано с использованием изогнутого монокристалла Ge (220) по методу Йоханссона. Энергетическое разрешение составляло 0.8 эВ при 5500 эВ. Для определения интенсивности входящего рентгеновского излучения использовалась ионизационная камера,

заполненная аргоном (давление газа 300 мбар). Сигнал, прошедший через образец, регистрировался сцинтилляционным детектором SC-70.

На рис. 1 приведены микроскопические изображения коллоидных частиц V_2CT_x , полученных из водного раствора. Как видно на рис. 1, частицы V_2CT_x представляют собой двумерные пленки размером 0.5–2 мкм, которые не содержат дополнительных примесных фаз. Эти двумерные пленки расслаиваются на отдельные наноллисты V_2CT_x .

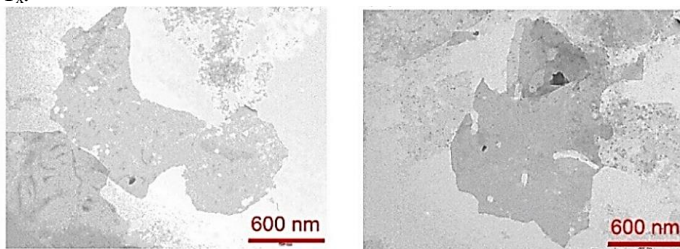


Рис. 1. ПЭМ изображения коллоидных частиц V_2CT_x

Для определения валентного состояния атомов ванадия в полученном $d-V_2CT_x$ MXene был проведен анализ XANES V K-края поглощения. На рис. 2 показаны нормированные XANES образца V_2CT_x (обозначено как V film) и двух стандартов V_2O_3 (V^{3+}) и V_2O_5 (V^{5+}). Энергетическое положение K-края поглощения, определяемое по максимуму первой производной края, зависит от степени окисления поглощающего атома. Происходит сдвиг на несколько эВ в сторону больших энергий при увеличении степени окисления. Также, от степени окисления 3d металлов сильно зависит амплитуда предкраевой области спектра. Это обусловлено различной степенью заполнения предкраевой области спектра. Это обусловлено различной степенью заполнения предкраевой области спектра. Это обусловлено различной степенью заполнения предкраевой области спектра. При изменении степени окисления от V^{3+} до V^{5+} происходит смещение положения V K-края примерно на 3 эВ. Как видно из рис. 2а энергетическое положение V K-края исследуемого образца V_2CT_x полностью совпадает с положением края поглощения V_2O_3 , указывая что степень окисления ванадия в образце равна 3+.

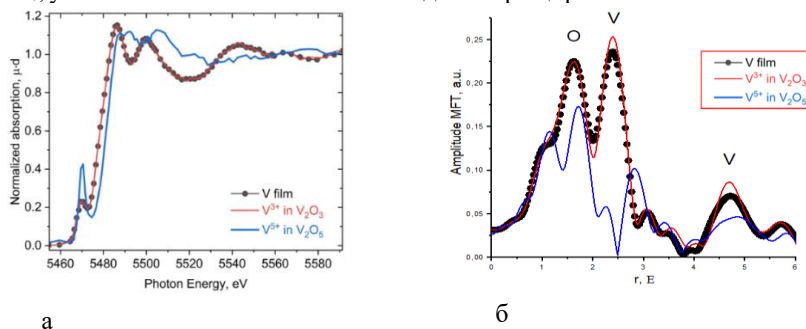


Рис. 2. Нормированные XANES (а) и МФТ EXAFS (б) V K-краев поглощения образца V_2CT_x (V film) и двух стандартов V_2O_3 и V_2O_5 .

Кроме того, амплитуда предкрая и форма XANES V film в точности совпадает с XANES оксида V_2O_3 , что может указывать на идентичность локального атомного окружения ионов ванадия в этих соединениях. Этот вывод подтверждает рассмотрение модулей Фурье преобразования (МФТ) EXAFS V K-краев поглощения образца V_2CT_x и двух стандартов V_2O_3 и V_2O_5 , показанные на рис. 2б. Как видно из рис. 2б МФТ V_2CT_x и V_2O_3 практически совпадают, указывая, что локальное атомное окружение ионов V^{3+} в пленке совпадает с атомным строением оксида V_2O_3 в пределах нескольких координационных сфер.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности, проект № FENW-2023-0014).

1. Tsyganov A., Vikulova M., Zotov I., Grapenko O., Vlasenko V., Bainyashev A., Gorokhovskiy A. and Gorshkov N., Nanoscale, 2024, 16, 15208-15218. <http://dx.doi.org/10.1039/D4NR01612B>

ИССЛЕДОВАНИЕ ГРАДИЕНТНОГО ИЗМЕНЕНИЯ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА НАНОРАЗМЕРНОЙ ПЛЕНКИ $Ti_xO_{(1-x)}$

Гусейнов Т.З.^{1,2}, Бакиева О.Р.², Валеев Р.Г.², Картапова Т.С.², Бельтюков А.Н.²,
Хаметова Э.Ф.²

¹ Удмуртский Государственный Университет, Ижевск, Россия

² Удмуртский Федеральный Исследовательский Центр УрО РАН, Ижевск,
Россия

e-mail: timurguseinoff@yandex.ru, тел.: 8 (904) 3125453

В настоящее время одними из актуальных современных материалов являются мемристоры. Мемристор – это электрический элемент, который может изменять сопротивление в зависимости от протекающего через него электрического заряда. Благодаря своим свойствам, перспективы применения мемристоров обширны: от устройств хранения и обработки памяти до создания суперкомпьютеров. Группа китайских ученых создала устройство на базе мемристоров, чья вычислительная мощность превышает графические ускорители по скорости в 442-1450 раз [1]. Конструкция устройства состоит из двух электродов между которыми расположен диэлектрический слой. В качестве функционального слоя могут использоваться тонкие пленки нестехиометрических оксидов металлов. Основные свойства резистивного переключения зависят от толщины и дефектности функционального слоя. Существует проблема доокисления нестехиометрического оксидного слоя, что может приводить к ухудшению свойств резистивности и уменьшению срока службы устройства [2].

Нами проведен ряд работ по синтезу и диагностике наноразмерных нестехиометрических оксидных пленок титана. Методом магнетронного напыления на установке ВУП-5 были синтезированы многослойная система оксида титана градиентного состава по кислороду, а также контрольные образцы тонких пленок Ti - O, нанесенные на подложки из монокристаллического кремния. Синтез пленки градиентного состава проводили с увеличением концентрации кислорода в камере на 5 % каждые 5 минут, в результате чего была получена система, состоящая из тонких слоев нестехиометрического оксида титана.

С помощью метода Оже-электронной спектроскопии в комплексе с профилированием ионами аргона малых энергии получили информацию о качественном и количественном элементном составе тонких пленок. Методом атомно-силовой микроскопии были оценены сплошность и шероховатость синтезированных пленок, были определены толщины контрольных образцов и слоев в многослойной системе. Полученные результаты позволили оценить элементную однородность синтезированных пленок, построены зависимости изменения концентрации химических элементов от глубины профилирования. Для оценки степени деградации нестехиометрических слоев оксида титана градиентного состава повторно провели анализ через 100 дней.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ №1022040600207-2. Исследования

проводились в центре коллективного пользования «Поверхность и новые материалы» УдмФИЦ УрО РАН.

1. Yue W., Zhang T., Jing Z., Nature Electronics, 2024, 1-10.
2. Mehonic A., Kenyon A. J., Defects at Oxide Surfaces, 2015, 401-428.

ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК В ПРИСУТСТВИИ ПЛАЗМОННЫХ НАНОЧАСТИЦ

Дерепко В.Н.

*Воронежский государственный университет, г. Воронеж, Россия
e-mail: viol.physics@gmail.com, тел.: 8 (473) 220-87-80*

Разработка методов управления фотолюминесцентными свойствами полупроводниковых коллоидных квантовых точек (КТ) является одной из ключевых задач, решение которой необходимо для создания эффективных люминесцентных сенсоров [1]. В последнее время активно исследуется возможность управления параметрами люминесценции коллоидных КТ путем их размещения вблизи или внутри нанорезонаторов, таких как плазмонные наночастицы.

Идея модификации интенсивности и времени жизни спонтанного излучения осциллятора, находящегося вблизи резонатора, размером меньше длины волны излучения, была впервые предложена еще Перселлом [2].

Позднее было доказано, что присутствие плазмонных наночастиц (НЧ) вблизи полупроводниковых КТ может приводить к трансформации спектра, квантового выхода и кинетики люминесценции коллоидных КТ за счет плазмон-экситонного взаимодействия. При этом характер взаимодействия может быть определен как слабая (эффект Перселла), промежуточная (эффект Фано) или сильная связь (расщепление Раби).

Сказанное свидетельствует о том, что использование нанорезонаторов, таких как плазмонные НЧ, открывает широкие возможности для управления параметрами люминесценции коллоидных КТ. Помимо эффектов, наблюдаемых во время существования локализованного плазмона, важную роль могут играть процессы, происходящие после его декогеренции, связанные с переносом электронных возбудений (заряда или энергии) [4]. При этом реальная картина фотопроцессов, определяющих люминесцентные свойства коллоидных КТ в условиях плазмон-экситонной связи, оказывается сложна и требует установления механизма их взаимного влияния в каждом конкретном случае. Важно отметить, что большинство исследований в этой области посвящено КТ, обладающим экситонной люминесценцией. Проявления плазмон-экситонного взаимодействия в спектрах и кинетике рекомбинационной люминесценции КТ до сих пор остаются малоизученными.

В данной работе представлены результаты исследования смесей на основе КТ сульфидов и теллуридов металлов (CdS , $\text{Zn}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{S}$, Ag_2S , CdTe) с плазмонными НЧ золота и серебра. В присутствии плазмонных НЧ различной геометрии обнаружены эффекты Фано и Перселла в рекомбинационной люминесценции коллоидных КТ Ag_2S , $\text{Zn}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{S}$, CdS . В смеси КТ CdS/OA и сферических НЧ Ag наблюдалось увеличение квантового выхода рекомбинационной люминесценции в полосе с максимумом около 600 нм за счет эффекта Перселла, возникающего при слабом плазмон-экситонном взаимодействии в условиях растройки оптических резонансов компонентов. Аналогичное явление было отмечено в смесях КТ $\text{Ag}_2\text{S/L-Cys}$ и НЧ Au/CTAB после пространственного разделения компонентов за счет внесения в

смесь катионного полимера PolyDADMAC. В смеси КТ CdTe/3-MPA с нанопризмами (НП) Ag было реализовано управление люминесценцией путем лазерно-стимулированной трансформации нанопризм серебра в сферы размером 6-7 нм. При непосредственном контакте КТ CdS и Ag₂S с НЧ Ag и Au наблюдалось тушение экситонной люминесценции и разгорание рекомбинационной люминесценции, обусловленные резонансным безызлучательным переносом энергии. В присутствии НП Ag и наностержней (НСr) Au наблюдалась асимметрия спектральных контуров КТ, связанная с проявлением эффекта Фано.

1. Zhang H., Su Q., Chen S., Nature Communications, 2020, 11, 2826-1-8.
2. Purcell, E.M., Physical Review, 1946, 69, 11-12, 681.
3. Leng, H., Szychowski B., Daniel M.-Ch., [et al.], Nature Communications, 2018, 9, 4012.
4. Trotsiuk L., Muravitskaya A., Movsesyan A., [et al.], Nano Letters, 2023, 23 (18), 8524-8531.

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ ГИДРОЛИЗАТОВ КОЛЛАГЕНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗЛИЧНЫХ ФЕРМЕНТОВ

Евдокимова Е.Е., Жирякова А.В., Антипов С.С.,

ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, 394018, Университетская площадь, 1
e-mail: ekaterinaevdokimova4964@gmail.com, тел.: 8 (952) 540-94-53

Целью данной работы является оценка эффективности ферментативного гидролиза коллагена, входящего в состав эмульсии, полученной из дермальных покровов африканского сома (*Clarias gariepinus*) в стандартных условиях. Отправной точкой данного исследования стала проверка предположения о том, что гидролитическая устойчивость коллагена может значительно отличаться. Поэтому на первом этапе для тестирования гидролитической активности были выбраны трипсин, фицин, бромелин и папаин. Трипсин – основной пищеварительный фермент, а фицин, бромелин и папаин – последнее время часто используются как сопутствующие ферменты, увеличивающие биологическую доступность белка.

На сегодняшний день известно, что белковые фракции, присутствующие в дермальных покровах пресноводных гидробионтов имеют молекулярную массу преимущественно выше 100 кДа. Был проведен гидролиз коллагеновой эмульсии с использованием трипсина, фицина, папаина и бромелина. Обработка каждым ферментом проводилась в стандартных условиях, а именно при комнатной температуре, pH 7,4 в течении 5, 10, 15 и 20 минут в присутствии каждого фермента. Эффективность расщепления оценивалась с помощью электрофоретического фракционирования в денатурирующих условиях в 8% полиакриламидном геле. Полученные данные свидетельствуют о том, что наибольшей эффективностью гидролитического расщепления коллагеновых белков обладает трипсин, так как продукты гидролиза с его участием имели молекулярную массу ниже 10 кДа. В присутствии остальных ферментов (фицина, папаина и бромелина) было зарегистрировано присутствие как продуктов гидролитического расщепления с различной молекулярной массой, так и белковых фракции молекулярной массой выше 100 кДа, соответствующих исходным белкам.

Таким образом, полученные данные свидетельствуют о том, что коллагеновые белки могут быть гидролизованы не только с использованием высокоочищенной коллагеназы, но и с использованием других ферментов, однако эффективность такого гидролиза не очень высока, поэтому в дальнейшем стоит сконцентрировать внимание на оптимизации условий проведения гидролиза, что позволит разработать технологию получения высокоэффективного биологически-совместимого продукта пищевого и косметологического назначения.

ИССЛЕДОВАНИЯ ОСТАТОЧНЫХ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ В МНОГОПЕРИОДНЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ GaN/AlN, ВЫРАЩЕННЫХ НА ПОДЛОЖКЕ SiC/Si

Еремеев К. А.¹, Курило Н.А.¹, Середин П.В.¹, Голощапов Д.Л.¹, Буйлов Н.С.¹,
Леньшин А.С.¹, Радама А.О.¹, Мизеров А.М.², Шарофиддинов Ш.Ш.^{2,3}

¹Воронежский государственный университет, Воронеж

²Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет Российской академии наук, Санкт-Петербург, Россия

³ФТИ им А.Ф. ИоофеРАН, Санкт Петербург, Россия

e-mail: kjcnz2001@gmail.com, тел.: 8 (473) 2208363

Целью работы является исследование остаточных упругих напряжений в эпитаксиальной периодической гетероструктуре на основе многопериодных сверхрешеток из соединений GaN/AlN после ее отсоединения от гибридной подложки SiC/Si. Исследования были проведены с использованием метода Рамановской микроспектроскопии. Спектры были получены с использованием конфокального Рамановского микроскопа РамМикс 532 (EnSpectr, Москва, Россия) с длиной волны возбуждающего излучения 532 нм. Сканирование осуществлялось с использованием 60х объектива. Мощность в фокусном пятне 30 мВт. Спектры детектировались в диапазоне 100-2000 см⁻¹ и спектральным разрешением 1 см⁻¹. Исследование пространственной области образца производилось с использованием двухосевой моторизованной подвижки с шагом 0.25 мкм вдоль всей структуры образца.

На Рис. 1 представлены схема многослойной гетероструктуры GaN/AlN, а также SEM изображения поперечного сечения образца.

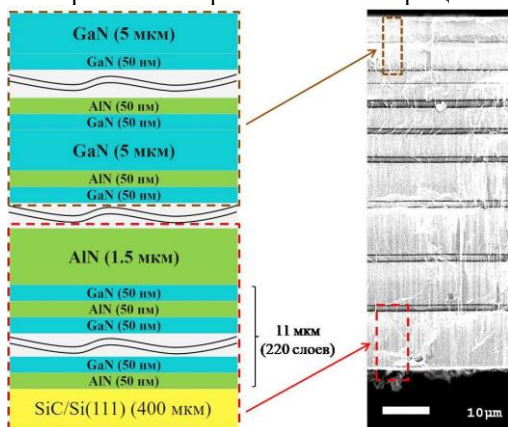


Рис.1. SEM изображение гетероструктуры и схематические изображения сверхрешетки.

Для послойного исследования структуры с высоким пространственным разрешением была выполнена съемка в геометрии $x(z)y\bar{x}$ с шагом 250 нм. Это

позволило получить набор фоновых мод из областей многопериодных сверхрешеток GaN/AlN, а также от буферных слоев AlN. Анализ спектров позволяет сказать, что выращенный на поверхности структуры кристалл GaN обладает вюрцитной структурой, а наблюдаемые сдвиги фоновых мод различной симметрии определенно связаны с деформациями слоев, обусловленными разницей в параметрах решетки и коэффициентах термического расширения материалов слоев, и возникающих при росте гетероструктуры.

Анализ результатов гиперспектрального картирования (см. Рис. 2 а,б) наглядно визуализирует структуру слоев в образце: на картах выделяются полосы с наибольшей/наименьшей интенсивностью GaN/AlN, а расстояние между этими полосами соотносится с изображением SEM. На Рис. 2 (с) представлена карта двухосных напряжений в области скола пленки. Хорошо видно, что в верхнем GaN слое величина двухосного напряжения σ_{xx} имеет минимальное значение ~ -0.12 ГПа.

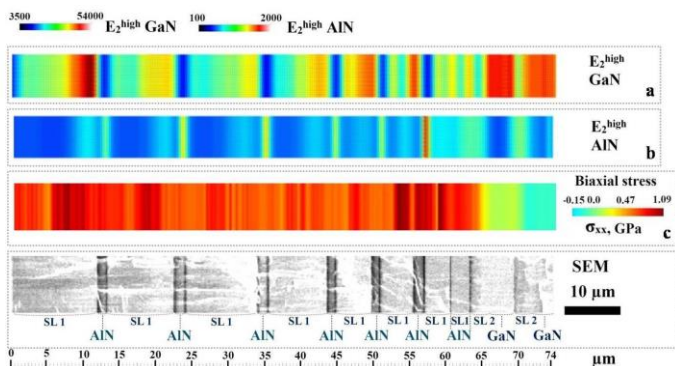


Рис.2. Гиперспектральное рамановское картирование области скола пленки на основе на основе распределения интенсивности фоновых мод E_2^{high} GaN (а) и E_2^{high} AlN (б), а также распределения упругих напряжений в многослойной гетероструктуре (с)

Таким образом, показано, с использованием наномасштабного картирования в верхних слоях GaN величина двухосного напряжения σ_{xx} имеет минимальное значение ~ -0.12 ГПа. При этом в сверхрешетках расположенных в верхней части структуры, напряжения практически отсутствуют.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда 19-72-10007.

1. Anshah-Antwi K.K., Soh C.B., Liu H., Chua S.J. Growth optimization and characterization of GaN epilayers on multifaceted (111) surfaces etched on Si(100) substrates. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films.

СТРУКТУРА МЕДНЫХ ЦЕНТРОВ ЦЕОЛИТОВ ТИПА Cu-MOR, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ЖИДКОФАЗНОГО СИНТЕЗА

Ермакова А.М., Сухарина Г.Б., Гладченко-Джевелекис Я.Н., Поносова Е.Е.
Бабаянц А.С., Кулаев К.Д., Прядченко В.В., Авакян Л.А., Бугаев Л.А.

Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, Россия

e-mail: ermakova.alexandra.bk@mail.ru

Цеолиты являются катализаторами в процессе превращения метана в метанол, что делает их использование важным для нефтехимической отрасли. Металлосодержащие цеолиты, обладающие уникальной пористой структурой и свойствами, представляют собой перспективные материалы в качестве катализаторов в этой реакции. Интерес к исследованию структуры цеолитов обусловлен их потенциалом значительно повысить эффективность превращения метана в метанол, что особенно актуально ввиду высокой сложности и затратности этого процесса [1-3].

В данной работе были изучены образцы цеолитов типа Cu-MOR, полученные методом жидкофазного ионного обмена с помощью трехкратной пропитки ацетата меди на Na-мордените. Выполнено моделирование локальной атомной структуры активных центров меди на этапе активации кислородом для трех последовательных циклов. Анализ спектров рентгеновского поглощения XANES за *K*-краем меди был проведен в программном комплексе FDMNES методом конечных разностей [4]. Геометрическая оптимизация была выполнена в программном пакете Quantum Espresso с помощью теории функционала плотности (DFT) [5].

Подход, сочетающий в себе спектроскопию рентгеновского поглощения XANES и компьютерное моделирование позволил определить наиболее вероятные модели центров меди, сформированных в каркасе цеолита Cu-MOR.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-22-00438).

1. Pryadchenko V.V., Sukharina G.B. et al., Tech. Phys., 2021, 66, 1018-1024.
2. Srabionyan V.V., Sukharina G.B. et al., J. Phys. Chem. C, 2021, 125, 25867-25878.
3. Bozbag S.E., Alayon E.M.C. et al., Catal. Sci. Technol., 2016, 6, 5011-5022.
4. Joly Y., Phys. Rev. B, 2001, 63, 125120.
5. Giannozzi P., Baroni S. et al, J. Phys. Condens Matter., 2009, 21, 395502.

ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАЦИИ КРЕМНИЕВЫХ НАНОНИТЕЙ ЗОЛОТОМ, СЕРЕБРОМ И БИМЕТАЛЛОМ AuAg НА УСИЛЕНИЕ СИГНАЛА КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ НА ПРИМЕРЕ МОЛЕКУЛЫ РОДАМИНА 6G

Ерохина А.А.¹, Иваненко И.П.¹, Осминкина Л.А.¹

¹ МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия
e-mail: erokhina.aa19@physics.msu.ru, тел.: +7 (916) 2811300

ГКР является высокочувствительным и неинвазивным аналитическим инструментом, а потому перспективен для детектирования химических и биологических объектов в различных областях науки [1]. На данный момент актуальны исследования по разработке новых способов синтеза и модификации наноструктурированных ГКР-активных подложек с высокой воспроизводимостью и низкой стоимостью для практического применения метода. В данном исследовании получены три вида подложек на основе кремниевых нанонитей (КНН), модифицированных частицами разных металлов (Au, Ag и биметалла AuAg), а также проведено их сравнение на примере молекулы родамина 6G (R6G).

Подложки с КНН были получены из пластин кристаллического кремния с помощью металл-стимулированного химического травления (МСХТ) [2], а затем модифицированы разными металлами. Подложка с КНН погружалась на 30 секунд в смесь 0.01M водного раствора AgNO₃ (AuCl₃) и 5M плавиковой кислоты (HF) в соотношении 1:1. Для получения AuAg@КНН подложка сначала покрывалась с использованием раствора серебра, а потом золота по описанной выше методике.

В результате были получены образцы на основе КНН, модифицированных золотом, серебром и биметаллом AuAg, исследована морфология полученных образцов методом сканирующей электронной микроскопии. Также с помощью метода ГКР проведено сравнение двух типов подложек на примере детектирования молекулы R6G в пределах концентраций 10⁻⁵ - 10⁻⁷ моль/л.

На рис. 1 показаны микрофотографии СЭМ Ag@КНН, Au@КНН и AuAg@КНН соответственно, вид сверху. Приблизительный размер наночастиц металла составляет от 80 до 150 нм.

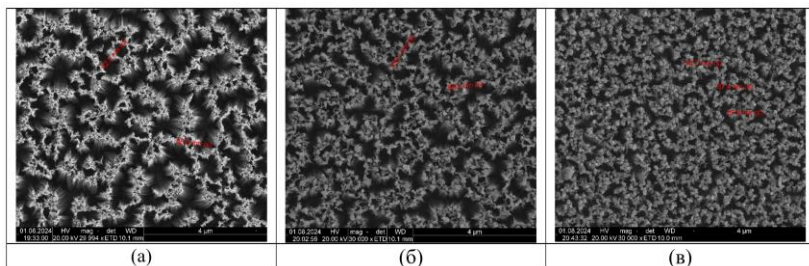


Рис.1 Микрофотографии СЭМ: а) Ag@КНН; б) Au@КНН; в) AuAg@КНН.

На рис. 2 приведены ГКР спектры молекулы R6G на разных подложках в концентрациях 10^{-5} , 10^{-6} и 10^{-7} моль/л соответственно, а также отмечены характерные пики R6G и кремния (520.5 см^{-1}). На приведенных спектрах видно, что подложка Ag@КНН наиболее эффективно усиливает сигнал исследуемой молекулы.

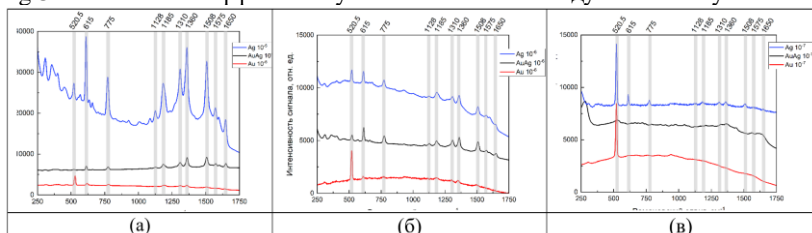


Рис.2 Сравнение спектра ГКР молекулы R6G на разных подложках в концентрации: а) 10^{-5} моль/л; б) 10^{-6} моль/л; в) 10^{-7} моль/л.

Полученные результаты демонстрируют, что наиболее эффективное усиление молекулы родамина 6G достигнуто при использовании подложки Ag@КНН, что наблюдается при всех рассмотренных концентрациях.

Представленные результаты работы могут быть использованы для создания высокочувствительных сенсоров для диагностики биомолекул.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 22-72-10062).

1. Osminkina L. A., Timoshenko V. Y. Porous Silicon as a Sensitizer for Biomedical Applications: Mini-review. Mesoporous Biomater 3: 39-48. – 2016.

2. Gonchar K. A. et al. Optical properties of nanowire structures produced by the metal-assisted chemical etching of lightly doped silicon crystal wafers //Semiconductors. – 2014. – Т. 48. – С. 1613-1618.

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И СОСТОЯНИЯ ПОЛУМЕТАЛЛОВ ДИРАКА И ВЕЙЛЯ В ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ИЗОЛЯТОРЕ ВИДА $Mn_{1-x}Ge_xBi_2Te_4$

Ерьюженков А.В.¹, Тарасов А.В.^{1,2}, Шикин А.М.¹

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

² Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия
e-mail: st037623@student.spbu.ru, tel. +7 (812) 428-4369

Магнитные топологические изоляторы представляют собой твёрдые тела с упорядоченной структурой, содержащей магнитные атомы в правильных кристаллографических позициях, благодаря чему в таких соединениях весьма отчётливо проявляется связь магнитных и топологических свойств, в частности, топологические поверхностные состояния (ТПС) в этих кристаллах обладают запрещённой зоной, обнаруженной экспериментально [1]. Наличие запрещённой зоны в ТПС влечёт за собой возможность реализации квантового аномального эффекта Холла (КАЭХ); таким образом, магнитные топологические изоляторы являются перспективной платформой для создания спинтронных устройств [2].

Соединение $MnBi_2Te_4$ является хорошо известным представителем данного класса материалов. В тонких плёнках $MnBi_2Te_4$ КАЭХ экспериментально наблюдался при температуре 1,4 К. При приложении достаточно сильного внешнего магнитного поля происходит переход из антиферромагнитного (АФМ) в ферромагнитное (ФМ) состояние, а температура, при которой возможно наблюдение КАЭХ, оказывается гораздо более высокой, равной 6,5 К [3]. Изучение переходов между различными магнитными конфигурациями, таким образом, оказывается весьма важной задачей.

Легирование кристалла $MnBi_2Te_4$ немагнитными атомами, например, германием, может служить одним из способов осуществления такого рода переходов, поскольку понижает эффективное обменное взаимодействие между слоями магнитных атомов. В данной работе были исследованы системы состава $Mn_{1-x}Ge_xBi_2Te_4$, характеризующиеся возможностью осуществления топологических фазовых переходов при изменении концентрации германия. Наблюдающиеся трансформации ТПС стали предметом активного изучения [4]; предположительно, контролируемое легирование может позволить управлять топологическими фазовыми переходами в данных системах [5].

В данной работе методами фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) и теоретических расчетов на основе теории функционала плотности (DFT) изучалось влияние замещения магнитных атомов Mn немагнитными атомами Ge в структуре $Mn_{1-x}Ge_xBi_2Te_4$. Полученные данные показали, что увеличение концентрации Ge с 10% до 75% приводит к уменьшению объёмной запрещённой зоны вплоть до её закрытия при концентрации Ge в диапазоне 45%—60%. Исчезновение ТПС наблюдается при концентрации Ge около 40%, а при дальнейшем увеличении концентрации Ge в энергетическом спектре

системы более чётко идентифицируются поверхностные состояния нетопологической природы с расщеплением 70—80 мэВ.

Результаты DFT-расчётов показывают, что топологический фазовый переход зависит от магнитной конфигурации $Mn_{1-x}Ge_xBi_2Te_4$. При наличии антиферромагнитного порядка переход происходит через одно промежуточное состояние: *топологический изолятор — полуметалл Дирака — тривиальный изолятор*. Если же система упорядочена ферромагнитным образом, то топологические фазовые переходы происходят через три промежуточных состояния: *топологический изолятор — полуметалл Дирака — полуметалл Вейля — полуметалл Дирака — тривиальный изолятор*.

Таким образом, в системе возможно образование состояний полуметалла Вейля. Точки Вейля, формирующиеся в ферромагнитной системе вдоль направления ΓZ , взаимно уничтожаются при уменьшении константы спин-орбитального взаимодействия (SOC) или при приложении к кристаллу растягивающих напряжений. Моделирование магнитного упорядочения также показало, что состояние полуметалла Вейля в ферромагнитной системе $Mn_{1-x}Ge_xBi_2Te_4$ достижимо при концентрации Ge около 40% без применения внешнего магнитного поля. Полученные результаты демонстрируют возможность тонкой настройки топологических свойств материалов через изменение их состава и магнитного упорядочения, что открывает перспективы для создания квантовых материалов с регулируемыми свойствами.

Работа проведена в рамках и при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-12-00016).

1. Otrokov M.M. et al. *Nature*, 2019, 576, 416—422.
2. Hasan M.Z. et al. *Rev. Mod. Phys.*, 2010, 82, 3045—3067.
3. Deng Y. et al. *Science*, 2020, 367, 895—900.
4. Makarova T.P. et al. *Nanomaterials*, 2023, 13 (14), 2151.
5. Tarasov A.V. et al. *Symmetry*, 2023, 15, 469.

ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКОЕ РАССЛОЕНИЕ КАРБИДА КРЕМНИЯ В СТРИМЕРНОМ РАЗРЯДЕ

Жукалин Д.А.¹, Долгих И.И.¹, Битюцкая Л.А.¹, Солдатенко С.А.²,
Синельников А.А.¹

¹ ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», г. Воронеж,
Россия

² ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»,
г. Воронеж, Россия
e-mail: d.zhukalin@mail.ru, тел.: +7 (951) 5685250

Среди низкоразмерных структур с ковалентным типом межслоевого взаимодействия особый интерес представляет карбид кремния, объемный прекурсор которого обладает широким спектром политипных модификаций (известно порядка 200 политипов SiC), что, в случае структур пониженной размерности, означает наличие богатых электрофизических свойств. Поэтому задача исследования структурной стабильности и свойств различных топологических форм 2D фаз карбида кремния в настоящее время является актуальной [1]. Между тем, не смотря на большое число работ по исследованию структурно-зависимых свойств многослойного SiC, вопрос получения хлопьев 2D карбида кремния определенного политипа, всё ещё остается мало изученным.

В настоящее время, для получения карбида кремния используются трудоемкие и энергозатратные методы: акустический [2], гидротермальный [3] и химический [4].

Наряду с механическим расслоением слоистых прекурсоров с ван-дер-ваальсовыми связями в работе [5] предприняты попытки использования электромеханическое расслоения в сильном постоянном электрическом поле для получения графена.

В настоящей работе рассмотрена возможность использования сильных локальных электрических импульсов в газоразрядной плазме, реализуемых в стримерном разряде для расслоения карбида кремния при нормальных условиях.

Традиционный способ получения стримерного разряда – использование импульсного генератора высокого напряжения с длительностью фронтов и крутизной порядка наносекунд [6]. Именно такие генераторы использовались для возбуждения кристаллических полупроводников в лазере [7], проводирования ядерных реакций в электрическом разряде [8] и для производства озона в барьерном разряде [9].

В электротехнике образование стримеров в газоразрядной плазме зачастую рассматриваются как паразитные эффекты, при этом в настоящей работе гладкие стримеры рассматривается как технологический инструмент.

В настоящей работе, в качестве исходного материала использовался монокристаллический карбид кремния политипа 4H. Электромеханическое расслоение карбида кремния в стримерном разряде осуществлялось по запатентованной авторами технологии [10].

Сверхзвуковая скорость стримера приводит к механическому характеру воздействия. При воздействии на исходный образец монокристаллического карбида

кремния наблюдается разрушение пластин с образованием порошка хлопьев, которые оседали на съемных вкладышах из фторопластовой пленки, размещенных на боковых стенках используемой разрядной камеры. Полученные хлопья видны в оптическом микроскопе только в проходящем свете, благодаря фазовому контрасту.

Идентификация полученных хлопьев карбида кремния производилась с помощью просвечивающей электронной микроскопии и микродифракции (Рис. 1). В результате получены 2 поли типа 2D карбида кремния связанных между собой. Анализ изображений и картины микродифракции показал, что по периферии частицы микронного размера распределены нанопластины фазы SiC структурного типа В20 с параметром решетки $a = 0,45 \pm 0,01$ нм. Латеральные размеры нанопластин этой фазы составляют около 20 – 100 нм. Для этих пластин характерна кристаллографическая огранка. Большинство из них ориентированы по оси $\langle 111 \rangle$ вдоль электронного пучка.

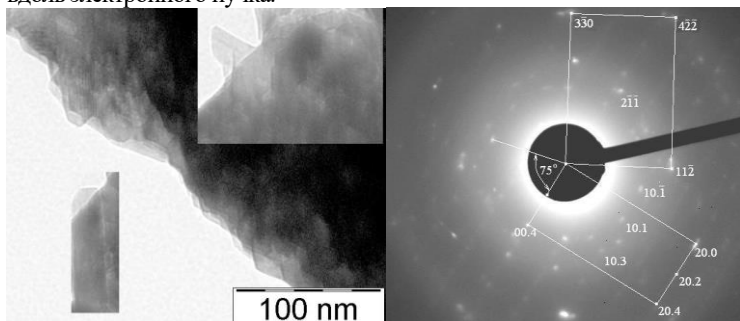


Рис. 1. ПЭМ изображения и картина микродифракции нанофазы SiC в результате протекания стримерного разряда.

Основной массив частицы составляют нанопластины гексагональной фазы SiC (4H) с параметрами решетки $a = 0,30 \pm 0,01$ нм, $c = 0,95 \pm 0,03$ нм. Решетка нанопластин по параметру c по сравнению с объемной решеткой SiC (4H) сжата на 5%, что, по-видимому, обусловлено электростатическим взаимодействием полярных граней (0001). Согласно оценке при степени ионности ковалентной связи SiC (10%) поверхностная плотность заряда составляет около $0,2$ Кл/м², напряжение сжатия $\sigma \langle 0001 \rangle$ - 21 ГПа. Такое напряжение обеспечивает сжатие нанопластины толщиной (1,006 нм) на 0,05 нм.

Таким образом в настоящей работе представлен простой и масштабируемый метод получения хлопьев 2D карбида кремния по запатентованной технологии [10]. Впервые продемонстрирован в чистом виде пондеромоторный пробой твердого минерала (9 по шкале твердости Мооса), происходящий на стримерной стадии разряда без перехода в искровую стадию и без выделения теплоты. По этой причине расколотый материал сохранил свою монокристаллическую решетку, не окислился и не расплавился. Это позволяет рассматривать гладкий стример как микромеханический зонд.

Работа выполнена при поддержке Центра коллективного пользования научным оборудованием ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет».

1. Калашников А.В., Тучин А.В., Битюцкая Л.А., Письма о материалах. 2019. Т. 9. № 2 (34). 173-178.
2. Mohiuddin T., Zhukov A., Elias D.C., Hill E., Morozov S.V., Geim A.K., Novoselov K.S., International Journal of Modern Physics B. 2009. 23(12n13):2641-6.
3. Chabi S., Guler Z., Brearley A.J., Benavidez A.D., Luk T.Sh., Nanomaterials. 2021. 11(7):1799.
4. Cao Yu., Dong H., Pu Sh., Zhang X., Nano Research. 2018. 11(8). 4074-4081.
5. Liang X., Chang A., Zhang Yu., Harteneck B., Choo H., Olynick D., Cabrini S., Nano Letters. 2009. 9(2):919.
6. Месяц Г.А., Яландин М.И., УФН. 2005. Т. 175. № 3. 225-246.
7. Месяц Г.А., Насибов А.С., Шпак В.Г., Шунайлов С.А., Яландин М.И., Квантовая электроника. 2008. Т. 38. № 3. 213-214.
8. Склизков Г.В., Шелоболин А.В., Краткие сообщения по физике ФИАН. 2018. 5. 11-17.
9. Kogelschatz U., Eliasson B., Egli W., Pure and Applied Chemistry. 1999. 71(10):1819-1828.
10. Долгих И.И., Жукалин Д.А., Битюцкая Л.А., Патент на полезную модель «Нанореактор получения 2D карбида кремния в стримерном разряде». 2023. RU 218008 U1.

НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОЛЛОИДНЫХ РАСТВОРОВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК Ag_2Se , ПАССИВИРОВАННЫХ 2-МЕРКАПТОПРОПИОНОВОЙ КИСЛОТОЙ В ПОЛЕ 10 НС ИМПУЛЬСОВ YAG:Nd^{3+} ЛАЗЕРА

А.И. Звягин, И.Г. Гревцева, С.В. Асланов, М.С. Смирнов, О.В. Овчинников

*Воронежский государственный университет, г. Воронеж, Россия
e-mail: andzv92@yandex.ru, тел.: 8 (473) 220-87-80*

Выполнено рассмотрение нелинейно-оптического отклика в коллоидных растворах квантовых точек (КТ) Ag_2Se , пассивированных 2-меркаптопропионовой кислотой (далее $\text{Ag}_2\text{Se}/2\text{-MPA}$). Исследованы три типа ансамблей, отличающихся условиями синтеза, а именно концентрацией вводимого в коллоидный раствор прекурсора селена. Их средние размеры составляли 2.0 - 2.5 нм. Для анализа нелинейно-оптического отклика в исследуемых коллоидных растворах использовали метод Z-сканирования, реализованный для 10 нс импульсов YAG:Nd^{3+} – лазера на длине волны 532 нм с частотой следования 1 Гц. Для всех исследованных образцов установлено нелинейное поглощение, а также нелинейная рефракция, проявляющаяся в виде дефокусировки. С ростом концентрации прекурсора селена при синтезе КТ $\text{Ag}_2\text{Se}/2\text{-MPA}$ Z-сканы, записанные в геометрии с открытой апертурой, демонстрируют уменьшение уровня нормализованного пропускания, а в геометрии с закрытой апертурой – снижение уровня нелинейной рефракции. Одновременно с этим по мере роста концентрации прекурсора Se установлено тушение полосы экситонной люминесценции (710-720 нм) и разгорание полосы trap-state люминесценции (940-980 нм). Для люминесценции в экситонной полосе характерные времена затухания составили 160-170 нс, а в полосе излучательной рекомбинации – существенно ускоренная кинетика с характерными временами в пределах 10-16 нс. На основании установленных закономерностей сделано заключение о том, что оптические переходы с участием центров рекомбинационной люминесценции не определяют процессы нелинейного поглощения и нелинейной рефракции. Однако вариация концентраций прекурсора Se влияет на условия кристаллизации, степень нестехиометрии формируемых нанокристаллов и концентрация оборванных связей оказывают влияние на усиление нелинейной рефракции. Предположено, что нелинейное поглощение в КТ $\text{Ag}_2\text{Se}/2\text{-MPA}$ вызвано преимущественно обратным насыщением поглощения и нелинейной рефракцией, которые реализуются за счет эффекта изменения заселенности локализованных состояний, вызванных как нестехиометрией, так и оборванными связями на интерфейсах КТ.

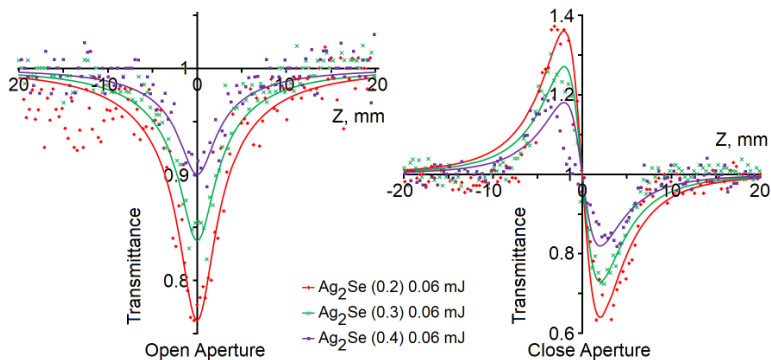


Рис.1. Кривые Z-сканирования коллоидных квантовых точек Ag₂Se/2-MPA, записанные в геометрии с открытой (а) и закрытой (б) апертурой на длине волны 532 нм и энергии зондирующих импульсов 0,06 мДж.

Работа выполнена при поддержке государственного задания вузам (№FZGU-2023- 0007).

ЗАВИСИМОСТЬ УДЕЛЬНОГО ЭЛЕКТРОСОПРОТИВЛЕНИЯ НА ПЕРЕМЕННОМ ТОКЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ *DLC*-ПОКРЫТИЙ ОТ СТРУКТУРЫ

Зур И.А.¹, Леоненко В.Ю.¹

¹Институт ядерных проблем БГУ, Минск, Беларусь
e-mail: zur.ilya01@gmail.com, тел.: (25) 9697091

DLC (diamond-like carbon) – метастабильная форма углерода физические свойства которой определяются концентрацией атомов в sp^2 -гибридном состоянии валентных электронов [1]. Для изучения структуры *DLC*-покрытий как правило используют спектроскопию комбинационного рассеяния света, рентгеновскую дифракцию и рентгеновскую фотоэлектронную спектроскопию (РФЭС). *DLC*-покрытия применяются к качестве износостойких, оптических и биосовместимых покрытий [2,3]. В *CERN* (European Organization for Nuclear Research) и ОИЯИ (Объединенный институт ядерных исследований) ведутся исследования по использованию *DLC*-покрытий в качестве резистивных слоёв на электродах газоразрядных детекторов [4] с целью увеличения стабильности функционирования и срока эксплуатации последних. Эффективность резистивного покрытия во многом определяется его электрофизическими свойствами [5]. В связи с этим, целью исследования является установление корреляции между структурой *DLC*-покрытий и их удельным сопротивлением на переменном токе методами РФЭС и импедансной спектроскопии.

Образцы *DLC*-покрытий (см. вставка рис. 1а) толщиной 22...70 нм осаждались на подложки из кремния (Si) марки КДБ-8 (далее *DLC*//Si) по методике, изложенной в работе [6]. Линии репрезентативного спектра РФЭС (см. Рис. 1а), соответствующие химическим связям C-O и C=O, указывают на окисление поверхности. Энергии электронов ≈ 284.40 эВ и ≈ 285.32 эВ для sp^2 и sp^3 гибридизации C-C связей, соответственно, согласуются с литературными данными [7]. Посредством анализа площадей фурье-подспектров линии C 1s зафиксировано возрастание концентрации атомов углерода в sp^2 -гибридном состоянии от 9 до 46% при увеличении толщины *DLC*-слоев от 22 нм до 46 нм.

Исследуемая структура In/*DLC*//Si/In (индий In обеспечивает электрический контакт) асимметрична по типу и концентрации носителей заряда, что приводит к формированию энергетического барьера на границе *DLC*//Si. Схематическое изображение зонной диаграммы с указанием общего уровня Ферми E_F представлено на рисунке 1б.

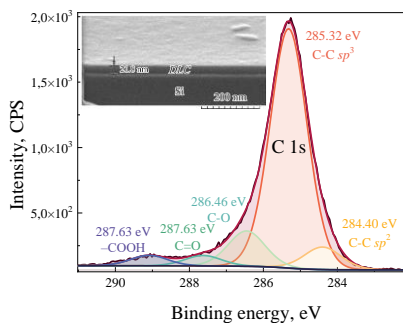


Рис. 1а – Деконволюция спектра РФЭС *DLC*-покрытия с учётом гибридизации

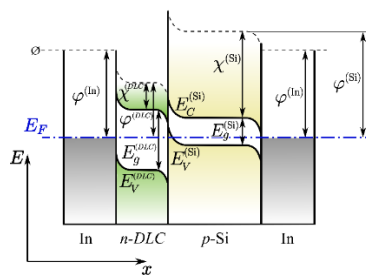


Рис. 1б – Схематическое изображение зонной диаграммы структуры *In/DLC/Si/In*

Анализ частотных зависимостей полного импеданса $Z(\nu)$ структуры (см. Рис. 2а) позволил сформировать ее электрическую эквивалентную схему (ЭС), которая состоит из двух последовательно включённых RC -контуров и последовательного сопротивления (см. вставка рис. 2б). Предложенная ЭС позволяет факторизовать вклады потенциального барьера на интерфейсе *DLC/Si* и непосредственно *DLC*-покрытия $Z_{DLC}(\nu)$ в полный импеданс структуры. Годографы импеданса имеют вид двух перекрывающихся полуокружностей, параметры которых зависят от толщины *DLC*-слоя (см. вставка рис. 2а). В области низких частот импеданс *DLC*-покрытий всех толщин полностью определяется резистивной составляющей (отсутствует вклад ёмкостных эффектов).

Анализ $Z_{DLC}(\nu)$ в частотном диапазоне 20 Гц до 1 МГц (см. Рис. 2б) показывает, что удельное электросопротивление *DLC*-покрытий ρ монотонно уменьшается с увеличением толщины d : в квазистатическом пределе ($\nu = 20$ Гц) ρ уменьшается от 1000 до 1 Ом·м.

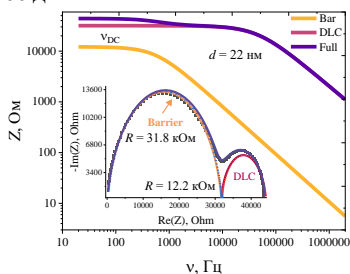


Рис. 2а – Частотная зависимость полного импеданса структуры $Z_{full}(\nu)$ и вкладов подконтуров $Z_{Bar}(\nu)$ и Z_{DLC}

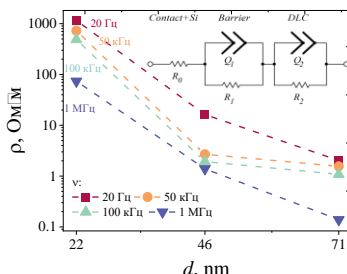


Рис. 2б – Зависимость удельного электросопротивления *DLC*-покрытия от толщины d

Методом РФЭС доказано, что увеличение толщины *DLC*-слоев, полученных плазменно-дуговым методом на положениях кремния, от 22 нм до 46 нм сопровождается ростом концентрации атомов углерода, находящихся в sp^2 -

гибридном состоянии валентных электронов от 9 до 46%, и уменьшением удельного электросопротивления от 1000 до 1 Ом·м при частоте зондирующего напряжения 100 Гц.

Исследования методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии выполнены при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351. Работа финансировалась в рамках государственной программы научных исследований «ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций», 2021-2025 годы», «Микро- и наноэлектроника») № г.р. 20212560.

1. F. Stock, F. Antoni, F. Le Normand, D. Muller, M. Abdesselam, N. Boubiche, and I. Komissarov, Appl. Phys. A 123, 590 (2017).

2. П. А. Августовский, Применение DLC-покрытий, нанесённых на текстурированные поверхности головок эндопротезов тазобедренного сустава, Working Paper, БНТУ, 2022.

3. Y. Deng, <https://proleantech.com/ru/dlc-coating-comprehensive-guide/>.

4. J. Metcalfe, I. Mejia, J. Murphy, M. Quevedo, L. Smith, J. Alvarado, B. Gnade, and H. Takai, arXiv:1411.1794 [hep-ex, Physics:Physics] (2014).

5. I. A. Zur, A. S. Fedotov, A. A. Kharchanka, Y. E. Shmanay, J. A. Fedotova, and S. A. Movchan, (2023).

6. И. А. Зур, Е. Е. Шманай, Ю. А. Федотова, А. А. Харченко, and С. А. Мовчан, Физика твердого тела 65, 49 (2023).

7. C. K. Park, S. M. Chang, H. S. Uhm, S. H. Seo, and J. S. Park, Thin Solid Films 420–421, 235 (2002).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СПИНОВОГО СОСТОЯНИЯ ИОНОВ МАРГАНЦА В МОНОКРИСТАЛЛЕ $\text{La}_{0.4}\text{Pr}_{0.3}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ.

Кантур И.Э.¹, Ярошенко Ю.М.¹, Бебенин Н.Г.¹, Гребенников В.И.^{1,2}, Миляев М.А.^{1,3}, Чумаков Р.Г.⁴, Кузнецова Т.В.^{1,3}

¹ИФМ УрО РАН, ул. Софьи Ковалевской, д. 18, г. Екатеринбург

²УрГУПС, ул. Колмогорова, д. 66, г. Екатеринбург

³УрФУ, ул. Мира, 19, г. Екатеринбург

⁴НИЦ "Курчатовский институт", пл. Академика Курчатова, д. 1, Москва

e-mail: iliakantur@yandex.ru, тел.: 8 (922)2938064

Метод рентгеновской эмиссионной спектроскопии (XES) [1] может эффективно использоваться для определения спиновых состояний 3d-элементов, которые определяют электронные и магнитные свойства материалов. В данной работе представлены результаты прямых экспериментальных исследований (рисунок 1) иона марганца в составе многокомпонентного одинарного манганита [2]. Форма рентгеновских эмиссионных спектров Mn K β _{1,3} является прямым доказательством высокоспинового состояния ионов марганца, что говорит нам о наличии марганца в нескольких степенях окисления.

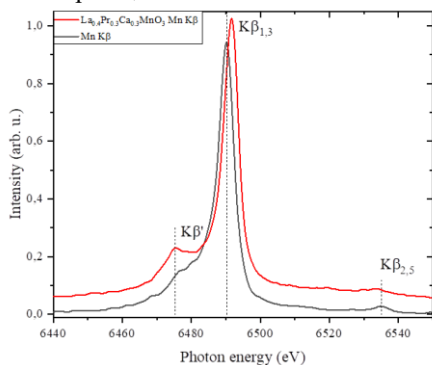


Рисунок 1. Экспериментальные XES спектры марганца в одинарном (верхний график) в сравнении с металлическим марганцем (нижний график).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ №23-72-00067

1. М.А. Блохин, *Методы рентгеноспектральных исследований*. Москва: Государственное издательство физико-математической литературы, 1959.

2. Р. И. Зайнуллина, Н. Г. Бебенин, В. В. Устинов, and Я. М. Муковский, "Упругие и магнитные свойства монокристалла $\text{La}_{0.4}\text{Pr}_{0.3}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$," *Физика металлов и металловедение*, vol. 114, no. 5, pp. 427–431, 2013

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И ФАЗОВОГО СОСТАВА ПЛЕНОК CU-SI, ПОЛУЧЕННЫХ ИОННО-ЛУЧЕВЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ МЕТОДАМИ УМРЭС И РФЭС

Керсновский Е.С.¹, Барков К.А.¹, Польшин И.В.¹, Терехов В. А.¹, Ивков С.А.¹,
Чукавин А.И.^{1,2}, Буйлов Н.С.¹, Ситников А.В.³

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

³ Воронежский государственный технический университет, Воронеж,
Россия

e-mail: kersnovsky@phys.vsu.ru, тел.: 8 (473) 2208363

Нанокompозитные пленки на основе Cu-Si применяются в различных областях микроэлектроники, катализа, технологиях кремниевых бронз и нового типа литий-ионных аккумуляторов. Кроме того, в ряде работ сообщалось, что медь, осаждаемая на кремниевую подложку, способствует активному окислению кремния на границе раздела Cu-Si [1] В то же время в системе Cu-Si ряд фаз до сих пор в значительной степени остается неизученным, а закономерности фазообразования изменяются в зависимости от концентрации элементов, способа получения и температуры процесса. Поэтому изучение электронного строения и фазового состава пленок Cu-Si является важной задачей.

В настоящей работе пленки Cu-Si различного состава (Cu ~15-65 вес. %) были получены методом ионно-лучевого распыления составной мишени на подложки кремния Si(111) марки КДБ-12 в вакууме при давлении $1 \cdot 10^{-5}$ торр. Рентгенодифрактометрические исследования проводились на дифрактометре ДРОН-4-07 с медным источником излучения $\text{CuK}\alpha_{1,2}$ ($\lambda=1,5406$ Å). Элементный анализ осуществлялся методом энергодисперсионной спектроскопии с помощью приставки INCA 250 к растровому электронному микроскопу JEOL JSM-6380 LV. Электронное строение пленок Cu-Si определялось методами ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС) на рентгеновском спектрометре монохроматоре РСМ-500 [2] и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) на спектрометре SPECS с использованием $\text{MgK}\alpha$ (1253.64 эВ) источника рентгеновского излучения.

В результате рентгенодифрактометрического анализа было установлено что в пленках Cu-Si различного состава формируются фазы $\gamma\text{-Cu}_3\text{Si}$ (в пленке с низким содержанием меди ~15 вес. %) и $\eta\text{-Cu}_3\text{Si}$ (в пленках более богатых медью >51 вес.%). Кроме того, в пленках с большим содержанием меди ~65 вес. % часть меди окисляется, формируя оксид Cu_2O . Формирование оксида Cu_2O в пленках Cu-Si подтверждается по данным РФЭС спектроскопии в $\text{Cu}2p$ спектрах. В свою очередь по РФЭС $\text{Si}2p$ спектрам видно, что часть атомов кремния находится в окисленном состоянии и образует с кислородом кремний-кислородные тетраэдры типа $\text{Si-Si}_3\text{O}$ и Si-O_4 , что соответствует степеням окисления Si^{1+} и Si^{4+} . Сильное окисление кремния может быть связано с каталитическими свойствами фазы Cu_3Si .

Методом УМРЭС были получены рентгеновские эмиссионные Si $L_{2,3}$ -спектры пленок Cu-Si различного состава (Cu ~15-65 вес.%) при глубине анализа 35 нм (Рис.

1). Анализ фазового состава пленок проводился путем компьютерного моделирования экспериментальных спектров с использованием известных эталонных спектров соединений на основе кремния. По результатам моделирования экспериментальных спектров, представленных в Таблице 1 в пленке с низким содержанием меди ~15 вес. % около половины атомов кремния (~55%) находится в фазе аморфного кремния и около 45% окисляются, образуя субоксид $\text{SiO}_{0,47}$.

Увеличение содержания меди в пленке приводит к формированию фазы Cu_3Si в количестве ~40% атомов кремния. Кроме того, в пленке образуется фаза диоксида кремния SiO_2 (~15%), а содержание фазы субоксида $\text{SiO}_{0,47}$ снижается до ~15%.

Дальнейшее увеличение содержания меди в пленке до ~65 вес.% приводит к формированию более богатого кислородом субоксида $\text{SiO}_{0,8}$ (30%) и увеличению содержания SiO_2 до ~30%.

Таблица 1 – Фазовый состав пленок Cu-Si различного состава (Cu ~15-65 вес. %) по данным УМРЭС.

| Содержание меди, вес. % | Фазовый состав | | | | |
|-------------------------|----------------|---------------------|--------------------|----------------|------------------------|
| | α -Si | $\text{SiO}_{0,47}$ | $\text{SiO}_{0,8}$ | SiO_2 | Cu_3Si |
| 15 | 55% | 45% | - | - | - |
| 51 | 30% | 15% | - | 15% | 40% |
| 65 | - | - | 30% | 30% | 40% |

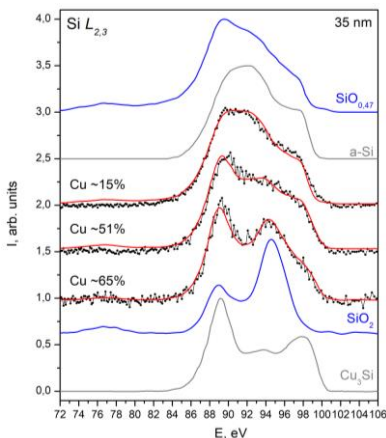


Рисунок 1 – $\text{Si L}_{2,3}$ -спектры пленок Cu-Si различного состава (Cu ~15-65 вес.%), эталонные спектры α -Si, $\text{SiO}_{0,47}$, SiO_2 , Cu_3Si . Смоделированные с использованием эталонных спектры (красные линии).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10294, <https://rscf.ru/project/23-79-10294/>.

1. H.H. Y., L.J. Chen, Growth kinetics of SiO_2 on (001) Si catalyzed by Cu_3Si at elevated temperatures, *Appl. Phys. Lett.* (2000).

2. V.A. Terekhov, V.M. Kashkarov, Manukovskii, A. V. Schukarev, E.P. Domashevskaya, Determination of the phase composition of surface layers of porous silicon by ultrasoft X-ray spectroscopy and X-ray photoelectron spectroscopy techniques, *J. Electron Spectros. Relat. Phenomena* 114–116 (2001) 895–900. [https://doi.org/10.1016/S0368-2048\(00\)00393-5](https://doi.org/10.1016/S0368-2048(00)00393-5)

ОСАЖДЕНИЕ ЗОЛОТА НА ПОРИСТОМ КРЕМНИИ МЕТОДОМ ВАКУУМНО-ТЕРМИЧЕСКОГО НАПЫЛЕНИЯ

Ким К.Б.¹, Черненко С.С.¹, Чукавин А.И.², Нифталиев С.И.¹, Леньшин А.С.^{1,3}

¹*Воронежский государственный университет инженерных технологий,
Воронеж, Россия*

²*УдмФИЦ УРО РАН, Ижевск, Россия*

³*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
e-mail: kmkseniya@yandex.ru*

Пористый кремний является весьма важным материалом для изготовления различных типов сенсоров. Его наноструктура с множеством микропор и большой внутренней поверхностью обладает рядом уникальных свойств, которые делают его привлекательным для применения в различных областях. Одним из применений пористого кремния является создание сенсоров для датчиков газовых и химических веществ. Благодаря большой поверхности, пористый кремний способен эффективно сорбировать целевые вещества и обеспечить их детекцию на очень низких концентрациях. При этом пористая структура позволяет обеспечить быстрый и чувствительный отклик сенсора. Функционализация поверхности пористого кремния золотом является важным этапом в процессе создания сенсоров и других устройств на основе пористого кремния. Она позволяет расширить возможности и улучшить свойства этого материала, делая его еще более привлекательным для широкого спектра приложений. В работе для улучшения характеристик датчиков на подложках пористого кремния (КЭФ 100) наносили слой олова золота вакуумно-термическим способом (ВУП). Методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS) проведен анализ поверхности материалов исходного пористого кремния, а также пористого кремния с золотом (SPЕCS ФТИ УРО РАН), по методике [1]. Обзорные спектры XPS позволяют идентифицировать химические элементы, присутствующие на поверхности образца, а также определить их состояние окисления и концентрацию. Используя эту информацию, можно получить ценные данные о составе поверхности и проводить анализ химической структуры образца. Полученные результаты показали, что при использовании вакуумно-термического метода может успешно применяться для получения нанокомпозитов пористого кремния с золотом. Спектры XPS показывают, что золото металлическое, не содержит примесей и окислов. По данным атомно-силовой микроскопии установлено, что осаждение тонкого слоя золота уменьшает шероховатость поверхности подложки пористого кремния.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (№ 22-73-00154 от 28.07.2022 г)

1. Lenshin A. S., Kashkarov V. M., Domashevskaya E. P., Bel'tyukov A. N., Gil'mutdinov F. Z. Applied Surface Science, 2015, 359, 550–559.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА NEXAFS ДЛЯ ПОИСКА ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ РЕАЛИЗАЦИИ МОРФОТРОПНОЙ ГРАНИЦЫ ДЛЯ НАНОПЛЁНОК $\text{La}(\text{Y})\text{:Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2$

Конашук А.С.¹, Филатова Е.О.¹, Лев Л.Л.², Черникова А.Г.², Зенкевич А.В.²

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

² Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия
e-mail: a.konashuk@spbu.ru, тел.: 8 (931) 5775476

Повышение величины диэлектрической проницаемости к уже использующихся в производстве диэлектриков без перехода к принципиально новым материалам является актуальной задачей микроэлектроники. Недавнее открытие эффекта сегнетоэлектричества в HfO_2 , обеспечиваемого с помощью допирования наноплёнок HfO_2 различными примесями (Al, Si, La, Gd...) [1,2] и/или смешивания HfO_2 с ZrO_2 в различных пропорциях, как раз открывает потенциальную возможность для такого повышения. Поскольку разные кристаллические фазы допированного примесью HfO_2 и твёрдого раствора $\text{HfO}_2\text{-ZrO}_2$ имеют различные значения диэлектрической проницаемости (по отдельности), это обуславливает интерес к тщательным исследованиям, имеющих целью контроль фазового состава наноплёнок $\text{HfO}_2\text{-ZrO}_2$ и повышения величины κ . В частности, для сегнетоэлектриков на основе перовскитов известно [3], что при определённом фазовом составе вблизи так называемой морфотропной границы (МФГ) результирующее значение κ поликристаллической плёнки может превышать соответствующее значение каждой кристаллической фазы в отдельности. В случае успешной реализации МФГ для наноплёнок $\text{HfO}_2\text{-ZrO}_2$ можно ожидать [4] повышения κ вплоть до ~ 50 , в то время как метастабильная полярная орторомбическая ($\text{Pca}2_1$) и неполярная тетрагональная ($\text{P}4_2/\text{nmc}$) фазы проявляют (при нулевом электрическом поле) значения $\kappa \sim 30$ и $\sim 35\text{-}40$, соответственно. В связи с этим нами был проведён фазовый структурный анализ наноплёнок $\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{O}_2$ (HZO), допированных атомами La и Y с концентрациями 0,4-1,4 мол.% и 0,5-2,6 мол.%, соответственно, с целью нахождения оптимальной концентрации примеси, позволяющей достичь МФГ для плёнок HZO.

Плёнки $\text{La}(\text{Y})\text{:HZO}$ толщиной 10 нм синтезировались методом ALD при температуре подложки 235 °C (280 °C) [5]. Подложка представляла собой последовательность слоёв Si-sub/W (50 нм)/TiN (20 нм). На поверхности $\text{La}(\text{Y})\text{:HZO}$ синтезировался методом ALD слой TiN толщиной 20 нм при температуре 400 °C (который в последствии для проведения исследований методом NEXAFS смывался 30% раствором H_2O_2 при температуре 60 °C в течение 10 мин). Дополнительный отжиг готовых тонкоплёночных структур не проводился, так как характерной чертой HZO является кристаллизация при температурах менее 400 °C.

Предварительный анализ с помощью GIXRD подтверждает наличие поликристаллической структуры у всех плёнок $\text{La}(\text{Y})\text{:HZO}$ [5]. Основной фазой является орторомбическая $\text{Pca}2_1$ (o-фаза) и/или тетрагональная $\text{P}4_2/\text{nmc}$ (t-фаза). К сожалению, в виду близости соответствующих межплоскостных расстояний o- и t-фаз, а также длины когерентности, ограниченной толщиной плёнок, не

представляется возможным различить с помощью GIXRD присутствие о- и т-фаз в структуре La(Y):HZO. Дополнительно GIXRD показывает наличие незначительных следов моноклинной P2₁/c м-фазы для 0,4% La:HZO и 0,5% Y:HZO, а для остальных плёнок следы м-фазы не выявлены.

Основной методикой получения информации о кристаллическом строении плёнок La(Y):HZO был анализ ближней тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения (NEXAFS) вблизи Zr M₃- и O K-краёв поглощения. Важно отметить, что для успешного анализа методом NEXAFS не является препятствием близость межплоскостных расстояний для о- и т-фаз HZO. Это обусловлено тем, что формирование ближней тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения главным образом происходит внутри ближайшего окружения поглощающего атома за счёт множественного рассеяния фотоэлектронной волны на окружающих атомах и её интерференции с первичной волной. В результате форма и положение деталей тонкой структуры высоко чувствительны к малейшим искажениям симметрии ближайшего окружения поглощающего атома, достаточно различающимся для разных кристаллических фаз в случае HZO. В случае т-HZO атомы Hf(Zr) окружены восемью атомами O, ближайшее окружение представляет собой два вложенных друг в друга тетраэдра Hf(Zr)O₄, слегка вытянутых и сжатых вдоль оси *c*. Для о-HZO и м-HZO ближайшее окружение атомов Hf(Zr) также можно рассматривать как комбинацию всё более сжимающихся/растягивающихся вдоль оси *c* тетраэдров, соответственно. Были рассчитаны валентные углы O-Hf(Zr)-O с использованием структурных данных [6] и на основе этого в рамках теории кристаллического поля [7] выявлялись детали тонкой структуры, связанные со всеми тремя т-, о-, м-кристаллическими фазами HZO. Измерения рентгеновских спектров поглощения проводились на экспериментальной станции НАНОФЭС синхротрона КИСИ-Курчатов, энергетическое разрешение было не хуже, чем E/ΔE = 1000. Также стоит отметить аддитивность поглощения рентгеновского излучения (поглощают независимо отдельные атомы), благодаря которой был осуществлён количественный анализ относительного содержания т- и о-фаз в плёнках La(Y):HZO.

В результате анализа Zr M₃-спектров поглощения подтверждено присутствие следов м-фазы в 0,4% La:HZO и 0,5% Y:HZO, а также оно выявлено для 1,1% Y:HZO (неразличимое при предварительном GIXRD анализе). Также можно сделать важный вывод о незначительном содержании м-фазы по отношению к содержанию о-фазы для всех данных плёнок.

Наиболее информативен анализ O K-спектров поглощения. В результате теоретического анализа и изучения формы реперных спектров чистых т-, о- и м-фаз установлены детали тонкой структуры наиболее чувствительные к относительному содержанию т- и о-фаз. Также выявлены детали, однозначно связанные с присутствием т- и м-фаз, анализ которых повышает достоверность делаемых выводов. С помощью подбора линейной комбинации модельных спектров чистых т- и о-фаз были получены относительные содержания т- и о-фаз во всех плёнках La(Y):HZO. Проведены корреляции между соотношением содержания т-/о-фаз и электрофизическим откликом наноплёнок La(Y):HZO. В частности, показано, что именно при сопоставимом содержании т-/о-фаз ~35%/65%, обеспечиваемом за счёт

среднего уровня допирования около 1 мол.% как атомами La, так и Y, достигается максимум величины диэлектрической проницаемости $\kappa=45$, превосходящий значение для чистой т-фазы. Таким образом, метод NEXAFS был успешно применён для демонстрации возможности достижения МФГ для наноплёнок La(Y):HZO. В дальнейшем планируются *operando* исследования кристаллического строения плёнок La(Y):HZO на различных этапах сегнетоэлектрического циклирования.

1. Böске T.S., Müller J., Bräuhaus D., Schröder U., Böttger U., Applied Physics Letters, 2011, 99, 102903
2. Chernikova A.G., Kuzmichev D.S., Negrov D.V., Kozodaev M.G., Polyakov S.N., Markeev A.M., Applied Physics Letters, 2016, 108, 242905
3. Ahart M., Somayazulu M., Cohen R.E., Ganesh P., Dera P., Mao H.K., Hemley R.J., Ren Y., Liermann P., Wu Z., Nature, 2008, 451, 545-548
4. Jung M., Gaddam V., Jeon S., Nano Convergence, 2022, 9, 44
5. Kozodaev M.G., Chernikova A.G., Korostylev E.V., Park M.H., Khakimov R.R., Hwang C.S., Markeev A.M., Journal of Applied Physics, 2019, 125, 034101
6. Materials Project, <https://next-gen.materialsproject.org/>
7. Albright T.A., Burdett J. K., Whangbo M.H., Orbital Interactions in Chemistry: Second Edition; John Wiley and Sons: Hoboken, 2013.

ВЛИЯНИЕ МОЛЕКУЛ ТЕТРАЦИКЛИНОВОГО РЯДА НА ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК Ag_2S , ПАССИВИРОВАННЫХ МОЛЕКУЛАМИ ТИОГЛИКОЛЕВОЙ КИСЛОТЫ

Кондратенко Т.С.¹, Зябкина М.М.¹, Овчинников О.В.¹, Лачинов Д.А.¹, Гревцева И.Г.¹

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
e-mail: optichka@yandex.ru, тел.: 8 (473) 2233322

В последние несколько лет остро стоит вопрос о разработке новых технологий и материалов скрининга окружающей среды и продуктов питания на присутствие антибиотиков. Перспективным рецептором в люминесцентной сенсорике признаются полупроводниковые коллоидные квантовые точки (КТ), химия поверхности которых обеспечивает возможность связывания с различными молекулами, а управление размером обеспечивает настройку спектрально-люминесцентных свойств в широком спектральном диапазоне [1]. Для разработки люминесцентных сенсоров на основе КТ актуальным является решение фундаментального вопроса взаимодействия молекул антибиотика с рецептором и его проявление в спектрально-люминесцентных свойствах. В ряде работ [1,2] показано, что такое взаимодействие достаточно специфично и требует выяснения закономерностей и природы их проявления в каждом конкретном случае. В настоящей работе рассмотрено влияние молекул антибиотика тетрациклиновой группы окситетрациклина (ОСТ) на люминесцентные свойства КТ Ag_2S , пассивированных молекулами тиогликолевой кислоты (КТ Ag_2S/TGA).

Коллоидные КТ Ag_2S/TGA средним размером 2.5 ± 0.2 нм были получены в рамках водного коллоидного синтеза, который предполагает смешивание растворов прекурсоров в концентрациях, соответствующих молярному соотношению $[AgNO_3]:[TGA]:[Na_2S]=1:1:0.33$. Подробное описание приводится в работе [3].

На рисунке 1 (a,b) представлены спектральные проявления взаимодействия молекул ОСТ с КТ Ag_2S/TGA .

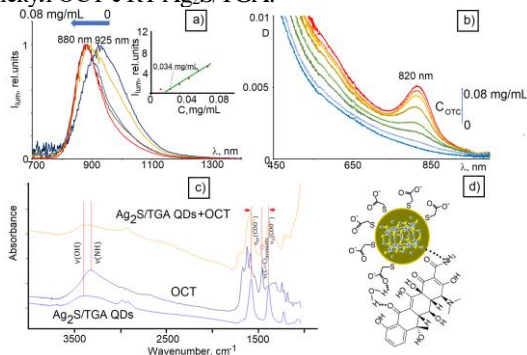


Рис.1. Проявление взаимодействия ОТС с КТ Ag_2S : Спектры люминесценции (a), спектры оптического поглощения (b); ИК спектры поглощения (c); структура интерфейса КТ

Для полученных КТ $\text{Ag}_2\text{S/TGA}$ положение полосы, обусловленной наиболее вероятным экситонным переходом в оптическом поглощении, составило порядка 1.6 эВ (780 нм). Полоса люминесценции, возбуждаемая излучением с длиной волны 780 нм, имеет максимум в области 940 нм. Стоксов сдвиг и полуширина полосы люминесценции указывает на рекомбинационный характер свечения [3]. Области возбуждения и детектирования сигнала свободны от собственного поглощения и свечения молекул тетрациклина.

Последовательное добавление раствора ОСТ в коллоидный раствор КТ приводит к существенным изменениям как в абсорбционных, так и в люминесцентных свойствах КТ (Рис. 1). Начиная с концентрации тетрациклина в растворе 0.034 мг/мл в люминесценции КТ $\text{Ag}_2\text{S/TGA}$ наблюдается рост интенсивности свечения в области 925 нм (Вставка на Рис 1а), которая достигает десятикратного увеличения при максимальной из используемых концентраций антибиотика. При этом наблюдается смещение пика свечения из области 925 нм к 880 нм и формирование в спектре поглощения ярко выраженной полосы в области 820 нм. Наблюдаемые закономерности интерпретированы как изменение характера свечения с рекомбинационного на экситонное вследствие допассивации поверхности КТ молекулами антибиотика.

Анализ данных ИК спектроскопии показывает, что в допассивации интерфейса КТ участвуют трикарбониламидная группа и фенольный дикетон молекулы ОТС. В частности сдвиг валентных колебаний COO^- группы (1573 см^{-1} к 1582 см^{-1} , 1383 см^{-1} к 1397 см^{-1}) и C=O (1665 см^{-1} к 1685 см^{-1}) свидетельствует об участии карбонила в водородных связях с группами COO^- молекул TGA в присутствии молекул воды [4], нивелирование полосы в области 3320 см^{-1} и изменения в области деформационных колебаний амидной полосы (NH) ($1300\text{-}1200 \text{ см}^{-1}$) свидетельствуют об участии трикарбониламидной группы во взаимодействии с интерфейсом КТ. Схематически структура интерфейса КТ в случае допассивации молекулами ОСТ представлена на рис. 1d.

Таким образом, показано, что молекулы ОСТ допассивируют поверхность КТ $\text{Ag}_2\text{S/TGA}$ за счет взаимодействия трикарбонильной группы и фенольного дикетона с оборванными связями интерфейса КТ, обеспечивая при этом разгорание люминесценции КТ. Полученные результаты указывают на возможность практического применения коллоидного раствора КТ $\text{Ag}_2\text{S/TGA}$ в качестве люминесцентного рецептора на присутствие в растворе антибиотиков тетрациклинового ряда.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 24-29-00668).

1. Oladipo A.A, Oskouei S.D and Gazi M., Beilstein J. Nanotechnol. 2023, 14, 631–673.
2. Anand S.K., Sivasankaran U., Jose A.R., Kumar K.G., Spectrochimica Acta Part A, 2019, 213, 410-415.
3. Smirnov M.S., Ovchinnikov O.V., Journal of Luminescence, 2020, 227, 117526.
4. Kulshrestha P., Rossman F. Giese J.R., Aga D.S., Environmental science & technology, 2004, 38, 4097-4105.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА И ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПЛЕНОК Nb-Si, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ

Коржова Т.А.¹, Барков К.А.¹, Терехов В.А.¹, Хадырова С.², Моисеев К.М.²,
Ивков С.А.¹, Керсновский Е.С.¹, Польшин И.В.¹, Новолокина Н.В.¹

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

e-mail: tatiana.corjowa@icloud.com, тел.: 8 (980)3782313

Нанокompозиты, изготовленные на основе наночастиц кремния и переходных металлов являются одними из перспективных материалов для изготовления таких приборов как ультрабыстрые сверхпроводниковые однофотонные детекторы в инфракрасном диапазоне и многослойные рентгеновские зеркала. Проблема таких пленок состоит в том, что в случае их формирования методом магнетронного распыления возникает большая вероятность формирования различных метастабильных фаз, которые могут отсутствовать на равновесных диаграммах состояний [1]. Поэтому вопросы диагностики структуры и фазового состава подобных объектов важны и актуальны.

Исследуемые пленки Nb-Si с разным фазовым составом были получены на кремниевых подложках Si(100) совместным магнетронным распылением двух мишеней ниобия и кремния. Были получены пленки со следующим атомным составом: Nb₅₀Si₅₀, Nb₆₅Si₃₅, Nb₇₅Si₂₅, Nb₈₅Si₁₅. Толщина пленок составила 100 нм. Фазовый состав пленок Nb-Si определялся методом рентгеновской дифракции. Электронное строение пленок было проанализировано по рентгеновским эмиссионным Si L_{2,3}-спектрам с помощью метода ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС) на спектрометре РСМ-500 [2].

По данным рентгеновской дифракции установлено, что все пленки Nb-Si вне зависимости от элементного состава рентгеноаморфны и для дальнейшего изучения был использован метод ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС).

С помощью метода УМРЭС были получены рентгеновские эмиссионные Si L_{2,3}-спектры пленок Nb₅₀Si₅₀, Nb₆₅Si₃₅, Nb₇₅Si₂₅, Nb₈₅Si₁₅ при глубине анализа 35 нм (Рис 1). В спектрах всех пленок Nb-Si главный максимум расположен при энергии E=90 эВ. Наличие в спектре высокоинтенсивного узкого максимума при E=90 эВ связано с формированием низших силицидов. Тем не менее в области плеча (92-100 эВ) интенсивность во всех спектрах завышена по сравнению со спектрами низших силицидов, особенно в случае пленки Nb₅₀Si₅₀ с максимальным содержанием кремния, что может быть связано с присутствием в пленках высших силицидов. Для определения фазового состава пленок было проведено компьютерное моделирование рентгеновских спектров, по результатам которого установлено, что исследуемые пленки Nb₅₀Si₅₀, Nb₆₅Si₃₅, Nb₇₅Si₂₅ содержат силициды Nb₅Si₃ и NbSi₂. С увеличением Nb в составе пленок Nb-Si от 50 до 85 ат. % содержание фазы Nb₅Si₃ увеличивается от 40% до 100%, а содержание фазы NbSi₂ уменьшается от 50 % до

0%. Кроме того, в плёнке $\text{Nb}_{50}\text{Si}_{50}$ часть атомов кремния окисляется с образованием SiO_2 (~10%).

Увеличение содержания ниобия в плёнке Nb-Si с 50 до 85 ат.% приводит к уменьшению удельного сопротивления от $7 \cdot 10^{-4}$ до $1,8 \cdot 10^{-4}$ Ом*см.

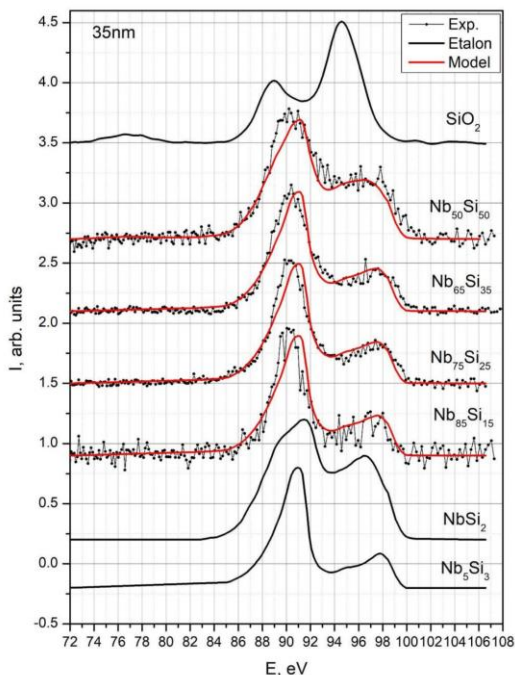


Рис.1. Рентгеновские эмиссионные Si $L_{2,3}$ -спектры пленок Nb-Si с разным содержанием ниобия, полученные при глубине анализа 35 нм, а также спектры эталонов диоксида кремния (SiO_2), низшего силицида ниобия (Nb_5Si_3) и высшего силицида ниобия (NbSi_2).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10294, <https://rscf.ru/project/23-79-10294/>.

1. Pan Y., Guan W.M., Journal Ceramics International, 2019, 45, 15649.
2. Зимкина Т. М. Ультратонкая рентгеновская спектроскопия. Изд-во Ленинградского университета, 1971. 132 С.

ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА СТРУКТУРУ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ХИМИЧЕСКИ ОСАЖДЕННЫХ НИКЕЛЕВЫХ ПОКРЫТИЙ

Кошелева О.К.², Буйлов Н.С.¹, Нестеров Д.Н.², Ильина Е.А.¹, Чукавин А.И.³, Столповская Н.В.¹

¹ *Лаборатория органических добавок для процессов химического и электрохимического осаждения металлов и сплавов, применяемых в электронной промышленности, Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

² *Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*
³ *Удмуртский федеральный исследовательский центр Уро РАН, Ижевск*
e-mail: olgak-98@yandex.ru, тел.: 8 (473) 2208363

Качество заполнения TSV (through-silicon via) напрямую зависит от качества и целостности барьерного и затравочного слоев. Чаще всего барьерные и затравочные слои получают методом физического осаждения из газовой фазы (PVD), однако при увеличении $AR > 10$ возникают сложности при получении конформных покрытий. Повысить качество покрытий в TSV с высокоаспектным соотношением позволяют методы химического осаждения из газовой фазы (CVD) и атомно слоевого осаждения (ALD) [1], однако высокая стоимость и низкая скорость осаждения делает их применение экономически нецелесообразным. В качестве альтернативного метода нанесения барьерного/затравочного слоя рассматривается химическое осаждение металлов [2]. Данный способ является хорошо изученным, достаточно простым и дешевым, при этом позволяет получать конформные покрытия, равномерно распределенные по всей площади TSV.

После осаждения никелевые покрытия находятся в неравновесном состоянии, отжиг при температуре 300° С приводит к кристаллизации Ni и образованию стабильной фазы Ni₃P [3], при температурах выше 400° С и длительном отжиге происходит существенное укрупнение зерен покрытия независимо от содержания P. Однако в работе [4] говорится о наличии аморфной фазы Ni₁₂P₅ в покрытии с высоким содержанием фосфора даже после отжига при температуре 400° С, что делает их перспективными для применения в качестве барьерных слоев в TSV.

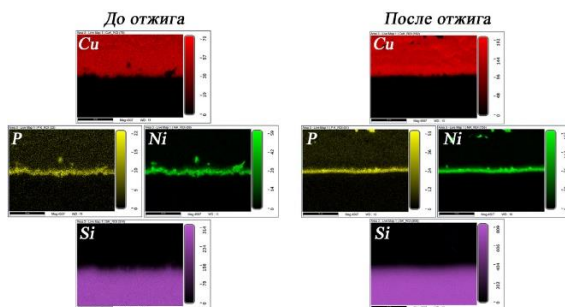
В данной работе было исследовано влияние отжига на кристаллическую структуру и фазовый состав химически осажденных никелевых покрытий. Осаждение Ni-P покрытий проводили на кремниевые пластины с нанесенным на поверхность изолирующим слоем SiO₂. Для нанесения Ni-P покрытия использовали раствор следующего состава (моль/л) [5]:

- NiCl₂·6H₂O-0,08;
- NaH₂PO₂·H₂O-0,28;
- NH₂CH₂COOH-0,2;
- CH₃COONa-0,12.

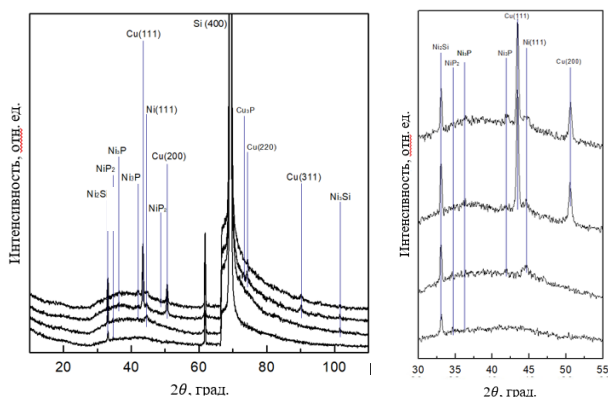
Далее полученные образцы отжигали при температуре 350 °С (t₁) в течение 15 минут в атмосфере азота N₂. Отжиг проводился в системе диффузионной однозонной многотрубной Сдом-3/100 (АО «НИИЭТ»). Далее на поверхность никелевых

покрытий осаждали медь электрохимическим способом и снова отжигали при температуре 200 °С (t_2).

Исследование элементного состава поверхности образцов в области поперечного среза проводились методом электронно-зондового микроанализа при помощи системы рентгеновского микроанализа EDAX «Octane Elect Plus EDS System». По данным картирования по элементам (рисунок 1) специально подготовленного поперечного среза образцов с осажденным на поверхности барьерного слоя $(\text{Ni-P})_{\text{II}}$ электрохимического медного покрытия наблюдаются четкие интерфейсы $\text{Si}/(\text{Ni-P})_{\text{II}}$ и $(\text{Ni-P})_{\text{II}}/\text{Cu}$ в двух исследуемых образцах, как до отжига так и после, что свидетельствует о непрерывности химически осажденного никелевого покрытия.



По данным рентгеновской дифракции обнаружено, что покрытия обладают аморфной структурой, которая сохраняется и после отжига. Отжиг покрытий приводит к формированию стабильных фаз металлического никеля и фазы Ni_3P в малом количестве. При этом на экспериментальных дифрактограммах не обнаружено рефлексов соответствующих образованию фаз Cu-Si как в образце $\text{Cu}/(\text{Ni-P})_{\text{I}}$ до отжига медного покрытия, так и в образце $(\text{Cu}/(\text{Ni-P})_{\text{I}})_{\text{II}}$ после отжига.



Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2022-2024 годы, проект № FZGU-2022-0003.

1. Lee Kang-Wook, Wang Hao, Bea Ji-Cheol, Murugesan Mariappan, Sutou Yuji, Fukushima Takafumi, Tanaka Tetsu, Koike Junichi, Koyanagi Mitsumasa, IEEE Electron Device Letters, 2014, 35(1), 114–116
2. Mariappan, Murugesan, IEEE 69th Electronic Components and Technology Conference (ECTC), 2019, 1047 – 1051.
3. Buchtik M.; Krystynova M.; Masilko J.; Wasserbauer J., Coatings, 2019, 9(7), 461.
4. K.G Keong; W Sha; S Malinov, Journal of Alloys and Compounds, 334, 2002, 192–199.
5. Kozaderov, O.; Sotskaya, N.; Yudenkova, L.; Buylov, N.; Ilina, E., Coatings 2023, 13, 1896.

СОВРЕМЕННЫЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ НОВЫХ АНТИБАКТЕРИАЛЬНЫХ ПРЕПАРАТОВ НА ОСНОВЕ БЕЛОК-ПОЛИСАХАРИДНЫХ КОМПЛЕКСОВ

Лавлинская М.С.¹, Сорокин А.В.¹, Гончарова С.С.¹, Кондратьев М.С.^{1,2},
Файзуллин Д.А.³, Зув Ю.Ф.³, Холявка М.Г.^{1,4}, Артохов В.Г.¹

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, РФ

² Институт биофизики клетки РАН – обособленное подразделение ФИЦ «Пуцинский научный центр биологических исследований РАН», Пуцино Московской области, РФ

³ Казанский институт биохимии и биофизики ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, РФ

⁴ Севастопольский государственный университет, Севастополь, РФ
e-mail: maria.lavlinskaya@gmail.com, тел.: 8 (473) 2208586

Растительные протеолитические ферменты, например, цистеиновые протеазы – бромелин (КФ 3.4.22.32), папаин (КФ 3.4.22.2) и фицин (КФ 3.4.22.3) эффективны против бактериальных пленок и при этом нетоксичны по отношению к тканям человеческого организма. Эти факторы делают их перспективными компонентами для разработки антибактериальных средств нового поколения, эффективных против резистентных штаммов микроорганизмов и лишённых побочных эффектов, характерных для традиционных антибиотиков. Вместе с тем наличие в активном центре названных ферментов тиольной группы остатка цистеина делает их низкостабильными и чувствительными к присутствию различных окислителей, взаимодействие с которыми приводит к потере протеолитической активности – параметра, обуславливающего антибиопленочные свойства ферментов. «Защитить» активный центр и стабилизировать активность ферментов во времени можно путем их взаимодействия с какими-либо носителями, например, полисахаридами. Однако подобный процесс может привести к снижению активности ферментов. Для выяснения причин этих нежелательных процессов, управления ими и модулирования практически значимых свойств энзимов необходимо выявить особенности взаимодействий в системе фермент-носитель, а также различные особенности строения носителя. Наиболее эффективно решить обозначенную задачу можно путем применения комплекса различных физико-химических и биофизических методов исследования, позволяющих анализировать исследуемые процессы на молекулярном уровне.

В связи с этим в настоящей работе была поставлена задача получить комплексы цистеиновых протеаз – бромелина, папаина и фицина – с 2-(4-ацетиамидо-2-сульфаниламид)хитозаном, обладающие антибактериальными свойствами, и стабилизирующие ферментную протеолитическую активность, а также выявить модулирующие ее факторы. Комплексы ферментов с 2-(4-ацетиамидо-2-сульфаниламид)хитозаном с молекулярными массами (ММ) 200, 350 и 600 кДа получали адсорбционной иммобилизацией в боратном буфере с рН 9.0 и характеризовали по содержанию белка, определенному методом Лоури, а также по значениям удельной протеолитической активности в реакциях гидролиза азоказеина.

Оптимальное количество белка в названных комплексах было рассчитано с использованием уравнения изотермы адсорбции Ленгмюра.

Оценка конформационного состояния ферментов в комплексах проводилась методами ИК-спектроскопии и молекулярного докинга. В ходе исследования выявлено, что комплексообразование повышает удельную протеолитическую активность папаина при взаимодействии с модифицированным хитозаном с ММ 350 кДа. Исследование комплексов и модифицированных полисахаридов методами ^1H ЯМР-спектроскопии и атомно-силовой микроскопии выявило тип отличия в морфологии поверхности носителей, что позволило выразить наблюдаемые особенности в величинах каталитической активности. При этом, все полученные комплексы обладают антибактериальной активностью в концентрациях, позволяющих рассматривать их в качестве перспективных антибактериальных агентов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 21-74-20053).

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКОГО МОДУЛЯТОРА НА ОСНОВЕ ЭФФЕКТА ОБЕДНЕНИЯ СВОБОДНЫХ НОСИТЕЛЕЙ

Лаврухина Е. А.¹, Бобров А. И.¹, Нежданов А. В.¹, Сидоренко К. В.¹, Хомицкий Д. В.¹

¹ *Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия
e-mail: ekaterina.a.lavrukhina@gmail.com, тел.: 8 (920) 0047907*

Кремниевый оптический фазовращатель, работающий на механизме обеднения свободных носителей, является одним из широко используемых приборов благодаря простоте изготовления и совместимости с высокоскоростным режимом работы в диапазоне частот до нескольких десятков гигагерц. При этом по эффективности модуляции, он сильно уступает фазовращателям на эффекте инжекции/накопления носителей [1]. Для улучшения оптических характеристик фазовращателей на основе механизма обеднения и увеличения их ширины полосы пропускания используется, в частности, оптимизация распределения максимальной и минимальной концентрации носителей заряда вдоль ребра волновода [2]. При этом сильно легированные области располагают на рёбрах волновода, где скапливается большое количество свободных носителей под действием обратного смещения, а область со слабым легированием должна находиться в сердцевине кремниевого волновода. Другой метод заключается в оптимизация геометрических параметров фазовращателя, при которых достигается минимизация перекрытий моды волновода с областью легирования, что хорошо сказывается на снижении оптических потерь, однако ухудшает эффективность модуляции.

В данной работе для высоколегированного кремниевого фазовращателя, функционирующего на механизме обеднения свободных носителей, была предпринята попытка выдержать баланс между тремя важнейшими показателями [3]: эффективностью фазового сдвига, вносимыми потерями и полосой пропускания, за счёт оптимизации геометрических размеров волновода. Численное моделирование проводилось в программном комплексе ANSYS Lumerical. В модуле CHARGE было получено распределение свободных носителей заряда в поперечной структуре волновода в зависимости от обратного напряжения смещения. В ходе оптимизации параметров волновода, а также при расчёте оптических мод, с использованием модуля MODE регистрировались изменения показателя преломления и величина оптических потерь сигнала на длине волны $\lambda=1550$ нм в зависимости от ширины волновода и прикладываемого напряжения. Таким образом была найдена оптимальная конфигурация оптического волновода, при которой наблюдается максимальное изменение показателя преломления и минимальные оптические потери. Для ширины оптического волновода 500 нм, управляющего напряжения 4 В и модуляции на частоте до 36 ГГц фазовый сдвиг на π будет достигаться при длине фазовращателя, равной 4.5 мм (эффективность модуляции – 1,75 В·см). Оптические потери на фазовращателе при этом составят 10.65 дБ/см. Эти результаты хорошо согласуются с экспериментальными работами [2,4].

В части математического моделирования работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № FSWR-2022-0007. В части эксперимента исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление № 1 «Национальный центр исследования архитектур суперкомпьютеров. Этап 2023-2025».

1. Rahim, A., Hermans, A., Wohlfeil, B., Petousi, D., Kuyken, B., Van Thourhout, D., Baets, R., *Advanced Photonics*, 2021, 3(2), 024003-024003.

2. Ding, R., Liu, Y., Ma, Y., Yang, Y., Li, Q., Lim, A. E. J., Hochberg, M., *Journal of Lightwave Technology*, 2014, 32(12), 2240-2247.

3. Witzens, J., *Proceedings of the IEEE*, 2018, 106(12), 2158-2182.

4. Streshinsky, M., Ding, R., Liu, Y., Novack, A., Yang, Y., Ma, Y., Hochberg, M., *Optics express*, 2013, 21(25), 30350-30357.

КРЕМНИЕВЫЙ ТЕРМООПТИЧЕСКИЙ ФАЗОВРАЩАТЕЛЬ ДЛЯ УПРАВЛЕНИЯ ИНТЕРФЕРОМЕТРОМ МАХА-ЦЕНДЕРА

Лемешевская Г.А., Скрылев А.А., Нежданов А.В., Сидоренко К.В.,
Бобров А.И., Николичев Д.Е.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
Россия, 603022 Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23
e-mail: lemeshevskaya@unn.ru, тел.: 8 (906) 3496425*

Фотоника – передовая отрасль науки, занимающаяся фундаментальными и прикладными аспектами работы с оптическими сигналами, фактически, являющаяся аналогом электроники. Концепция замены передачи информационного сигнала с помощью электронов на передачу с помощью фотонов позволяет увеличить быстродействие фотонных вычислительных устройств (ФВУ) [1]. В отличие от электроники, где основным устройством является транзистор, на чипе ФВУ используется несколько ключевых компонентов: соединительные волноводы, разделители мощности, оптические усилители, оптические модуляторы, фильтры, лазеры и детекторы. Таким образом, при создании ФВУ возникает необходимость использования различных материалов и технологий для реализации отдельных элементов, что определяет сложность в изготовлении приборной структуры и вносит дополнительные ограничения в техпроцесс.

Кремниевая фотоника использует стандартную материально-техническую базу предприятий микроэлектронной промышленности, что существенно упрощает процесс разработки и производства фотонных интегральных схем (ФИС). Система «кремний на изоляторе» позволяет интегрировать большое количество фотонных пассивных и активных компонентов в микрочиповом исполнении.

Одним из базовых элементов ФИС является интерферометр Маха-Цендера (ИМЦ). Он представляет собой входной и выходной разветвители, соединенные двумя планарными волноводами. Интерференция излучения, проходящего через них, осуществляется за счет наличия сдвига фазы электромагнитной волны, который возникает при воздействии различной физической природы (электрического, механического, акустического, термического и др.) на одно плечо модулятора. Приложение электрического поля приводит к возникновению эффектов Поккельса или Керра, однако они слабы в чистом кремнии на длине волны 1,55 мкм, применяемой в телекоммуникациях [2]. Другим вариантом внешнего воздействия на волновод, обеспечивающим сдвиг фазы в интерферометре, является термооптический эффект, ярко-выраженный в кремнии за счет большого термооптического коэффициента $\sim 2 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$ [3].

Для разработки прибора на основе ИМЦ с управляемой модуляцией оптического излучения необходимо создание математической модели, прогнозирующей поведение структуры при тепловом воздействии. Математическое представление реализовывалось в программной среде COMSOL Multiphysics® в совокупности с набором встроенных модулей для расчёта теплопередачи и процессов протекания электрических токов. В рамках используемых модулей решается упрощенное уравнение теплопроводности совместно с использованием закона Ома.

Геометрия модели включала кремниевую подложку толщиной 400 мкм с нанесенным сверху тонким слоем SiO_2 толщиной 6,5 мкм, внутри которого располагались два волноводных плеча ИМЦ из кремния (Рис.1 а). Над одним из волноводов располагался нагревательный элемент из TiN , температура которого изменялась вследствие протекания через него электрического тока. То есть, в модели реализовывался только процесс Джоулева нагрева без оптической составляющей работы интерферометра.

По результатам математического моделирования и теоретических расчетов была создана тестовая структура на материально технической базе филиала РФЯЦ-ВНИИЭФ НИИИС им. Ю. Е. Седакова. При этом использовалось плазмохимическое осаждение для формирования тонких плёнок, а также проекционная фотолитография совместно плазмохимическим травлением для получения топологического рисунка. Для контроля качества и геометрического соответствия сформированных структур с топологией модели были получены снимки с помощью растровой электронной микроскопии на поперечном срезе, представленные на рис. 1 б.

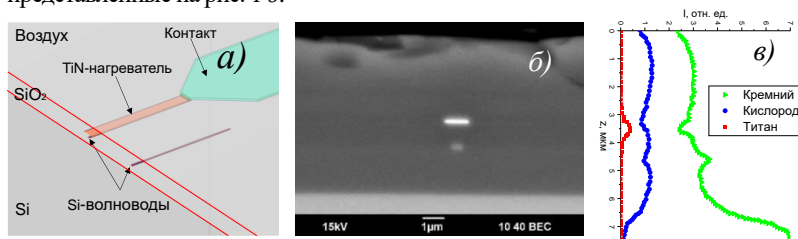


Рис. 1. а) общая геометрия математической модели, б) снимок РЭМ, в) профиль распределения по составу

Из полученного снимка хорошо видно, что топологическая форма нагревательного элемента и волновода совпадают с заложенными ранее в математическую модель. Также микрофотография позволяет произвести оценку геометрических размеров данных элементов на соответствие с используемыми параметрами в модельном представлении. Полученный с помощью энергодисперсионного анализа профиль распределения состава по глубине, представленный на рис. 1 в, показывает корректность выбранной области для контроля качества и геометрического соответствия сформированных структур.

Для верификации и калибровки математической модели проводилась серия экспериментов, которая заключалась в пропускании оптического излучения с длиной волны 1,55 мкм через ИМЦ и подаче на контакты нагревательного элемента напряжения с лабораторного блока питания в диапазоне от 0 до 10 В. При этом регистрировалась

мощность оптического излучения на выходе из интерферометра в зависимости от электрического воздействия на нагреватель. По результатам сравнительного анализа зависимостей установлено, что нагрев тестовой структуры происходит медленнее по сравнению с расчётными значениями в 1,75 раз, что связывается с рядом причин: наличие паразитного сопротивления на контактах, возникновение потенциального барьера на границе контактов металл-металл и привнесение паразитных химических примесей в TiN-нагревателе. В результате калибровки был определен температурный коэффициент, связывающий математическую модель с экспериментальными результатами.

В части математического моделирования работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № FSWR-2022-0007. В части эксперимента исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление № 1 «Национальный центр исследования архитектур суперкомпьютеров. Этап 2023-2025».

1. А.И. Белоус и др., Основы проектирования субмикронных систем. - М.: Техносфера, 2020
2. G. Reed et. al, Nature Photon., 2010, 4, 518–526
3. N.C. Harris et al, Opt. Express 2014, 22, 10487-10493.

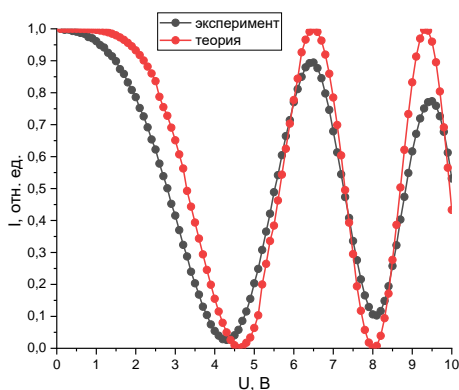


Рис. 2. Зависимость выходной интенсивности интерферометра от поданного на нагревательный элемент напряжения

ОСОБЕННОСТИ ОСАЖДЕНИЯ МЕДИ НА ПОРИСТЫЙ КРЕМНИЙ МЕТОДОМ ВАКУУМНОГО ТЕРМИЧЕСКОГО ИСПАРЕНИЯ

Леньшин А.С.^{1,2}, Черненко С.С.^{1,2}, Ким К.Б.², Ивков С.А.¹, Гречкина М. В.¹,
А.И. Чукавин³

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² Воронежский государственный университет инженерных технологий,
Воронеж, Россия

³ ФТИ УРО РАН, Ижевск, Россия
e-mail: lenshinas@mail.ru

Осаждение меди на пористый кремний (por-Si) представляет собой перспективное направление в области материаловедения и нанотехнологий. Полученные композиты могут быть использованы для создания новых типов электронных компонентов. Комбинация чувствительности por-Si и высокой проводимости меди открывает возможности для создания высокочувствительных сенсоров, особенно в области газовой сенсорики и биосенсорики.

Образцы мезо и макропористого кремния получали из пластин монокристаллического кремния (КЭФ, ориентация 100, удельное сопротивление 0,2 Ом·см) электрохимическим анодированием в электролите на основе плавиковой кислоты с добавлением диметилформамида для макропористого кремния [1]. Термическое осаждение меди проводилось на установке ВУП-4. Для получения подробной информации о морфологии поверхности, химических связях и их возможных деформациях на поверхности образцов пористого кремния (por-Si) были проведены исследования с использованием метода растровой электронной, атомно – силовой микроскопии и инфракрасной спектроскопии (ИК Фурье спектрометре Vertex 70 (Bruker) с использованием приставки для НПВО), а также получены данные методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

Анализ РЭМ-изображений образцов показывает, что толщина пористого слоя в образцах варьируется от 9 мкм до 10 мкм. Толщина пленки меди составляет примерно 100нм. Исходя из данных полученных РЭМ и АСМ для меди оказалось характерным осаждение на поверхности с образованием тонкой пленки, которая частично повторяет рельеф поверхности пористого кремния. Отметим, что при том же режиме осаждения на пластину монокристаллического кремния растет преимущественно островковая пленка с существенно большей шероховатостью.

Данные рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показывают, что пленка меди преимущественно металлическая, с небольшой долей оксида CuO. Анализ ИК-спектров пропускания исходного por-Si с осажденной пленкой позволяет сделать вывод о присутствии в пористом слое связей, Si-Si (616 см^{-1}), а также Si-H_x ($625, 2084, 2200\text{ см}^{-1}$), O_x-SiH_y (865 см^{-1}), O₃-SiH (900 см^{-1}) и Si-O-Si (1060 см^{-1}). После осаждения меди полосы на спектре гораздо менее интенсивные. Следует отметить, что в пористом кремнии связи типа Si-H_x и O_y-Si-H_y при хранении образцов активно участвуют в процессах окисления, заменяясь на связи типа Si-O-Si, что приводит к изменению и деградации различных функциональных характеристик этих структур. Поэтому их отсутствие после 30-дневной выдержки образцов на воздухе может

свидетельствовать о существенной стабилизации состава и свойств поверхности композита в отличие от ожидаемого дальнейшего изменения функциональных характеристик исходного пористого кремния в процессе естественного старения.

1. Lenshin A.S., Seredin P.V., Kashkarov V.M., Minakov D.A. Origins of photoluminescence degradation in porous silicon under irradiation and the way of its elimination/ *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2017. Т. 64. С. 71-76.

ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОНАМИ С ЭНЕРГИЕЙ 8 МЭВ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЛЕГИРОВАННЫХ ИНДИЕМ КРИСТАЛЛОВ Cu_2SnS_3

Лобанов А.Д.^{*1}, Ю.В. Корх¹, М.А. Сулимов^{1,2}, Е.И. Патраков¹,
Д.И. Радзивончик¹, В.И. Гребенников¹, Ш. Накамура³, М.Н. Сарычев²,
Р.Г. Чумакова⁴, В.Ю. Иванов², Т.В. Кузнецова^{1,2}

¹ *Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН,
Екатеринбург, Россия*

² *Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия*

³ *Национальный технологический институт, Нума Цуяма Окаяма, Япония*

⁴ *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
Москва, Россия*

e-mail: lobaleks1999@mail.ru, тел.: +7(982) 6913038

Материал Cu_2SnS_3 (CTS) обладает свойствами, подходящими для солнечных элементов и термоэлектрических устройств. CTS легко синтезируется и не содержит редких и токсичных элементов. Экспериментальные результаты показывают, что эффективность преобразования энергии солнечных элементов на основе CTS может достигать 6,7% [1]. Однако, согласно теоретическим данным, эффективность солнечных элементов на основе гетероструктур со слоем CTS может достигать 35,48% [2]. Легирование CTS индием позволяет улучшить практические свойства термоэлектрических устройств и солнечных элементов на основе CTS. Важным фактором, влияющим на работоспособность солнечных элементов и термоэлектрических устройств в космосе, является ионизирующее излучение. В данной работе исследуется влияние электронного облучения на электронную структуру и оптические свойства материала CTS, легированного индием. Исследуемые образцы содержат тетрагональную и кубическую фазы CTS.

Такие методы, как сканирующая электронная микроскопия (СЭМ), атомно-силовая микроскопия (АСМ), фотолюминесцентная (ФЛ) спектроскопия, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС) и спектроскопия комбинационного рассеяния (КР) в совокупности позволяют оценить изменение характеристик фотоэлектрических устройств после облучения. Таким образом исследовались кристаллы CTS, легированные индием, выращенные методом твердофазных реакций, до и после облучения электронами с энергией 8 МэВ и флюенсом 10^{14} см⁻². Методами СЭМ и АСМ установлено, что облучение высокоэнергетическими электронами приводит к разрушению зерен на поверхности кристаллов CTS. Соответственно исчезают поверхностные потенциалы, связанные с границами зерен. Спектр ФЛ для CTS при 7 К включает в себя пик при 0,87 эВ, характерный для CTS [3], пики при 1,06 эВ и при 1,14 эВ, соответствующие дефектам, образовавшимся в результате легирования CTS индием. После электронного облучения отмечается исчезновение пика при 0,87 эВ, что может быть связано с разрушением зерен CTS на поверхности образцов и/или удалением атомов олова вместо меди из кристаллической решетки CTS:In на поверхности образцов. Интенсивность пиков при 1,06 эВ и при 1,14 эВ существенно уменьшается после

облучения. По результатам РФЭС обнаружено увеличение олова и индия на поверхности образцов после электронного облучения. Это также подтверждают результаты, полученные методами АСМ, ФЛ. Результаты КР показывают, что облучение электронами приводит к деформации кубической фазы СТС.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-72-00067).

1. Minnam Reddy V. R., Pallavolu M. R., Guddeti P. R., Gedi S., Bathal Reddy K. K. Y., Pejjai B., Kima W. K., Kotte T. R. R., Parka C., J. Ind. Eng. Chem., 2019, 76, 39-74.
2. Mondal B. K., Abir A. T., Hossain J., Energy Technology, 2024, 12, 2301329.
3. Aihara N., Tanaka K., Uchiki H., Kanai A., Appl. Phys. Lett., 2015, 107, 032101

ЦЕНТРЫ СВЯЗЫВАНИЯ ЦИНКА В АЛЬБУМИНЕ: XANES ИССЛЕДОВАНИЯ

Лысенко В.Ю.¹, Пронина Е.В.¹, Кременная М.А.¹, Яловега Г.Э.¹

¹ Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, Россия
vlysenko@sfnedu.ru, тел.: 8 (903) 4702933

Цинк - важный микроэлемент, необходимый для многих процессов жизнедеятельности живых организмов. Он обладает большой способностью связываться с большинством внутриклеточных лигандов и участвует практически во всех биологических процессах. Именно поэтому гомеостаз и транспортировка цинка в организме представляют большой интерес. Основным переносчиком ионов цинка (Zn^{2+}) в организме является белок плазмы крови - сывороточный альбумин, отвечающий за их транспортировку. В работе [1] было показано, что сывороточный альбумин имеет несколько центров связывания цинка с разным сродством.

Для анализа локального окружения ионов цинка в структуре альбумина были отобраны две структуры из базы данных PDB - 5jif (сывороточный альбумин человека) и 5iix (сывороточный альбумин лошади). Структура 5jif имеет единственный центр связывания Zn^{2+} , который координируется аминокислотными остатками His67, Asp249, His247 и одной молекулой воды. В структуре 5iix есть 10 центров связывания Zn^{2+} . Один из этих центров связывания Zn координируется аминокислотными остатками His67, Asp249, и двумя молекулами воды. В другом центре связывания ион Zn^{2+} координируется остатками Glu152, His156, His287. Оставшиеся 8 центров связывания Zn^{2+} содержат один гистидиновый остаток и три молекулы воды. Для всех центров связывания Zn^{2+} были рассчитаны спектры рентгеновского поглощения XANES методом конечных разностей. Показана чувствительность спектров XANES к незначительным изменениям геометрии окружения ионов цинка, а также разным центрам связывания с разной аффинностью. Полученные данные будут полезны в дальнейшем для определения дополнительных центров связывания, и как следствие ранней диагностики болезней, связанных с дисфункцией белков.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №19-29-12052 mk).

1. Handing K.B., Shabalin I.G., Kassar O., Khazaipoul S., Blindauer C.A., Stewart A.J., Chruszcz M., Minor W., Chem. Sci., 2016, Vol 7, №11, P. 6635–6648.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В НЕДИСПЕРГИРУЮЩИХ ОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ

Макаров П.А., Скандаков Р.Н., Некипелов С.В., Сивков В.Н.

ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, Россия
e-mail: makarovpa@ipm.komisc.ru, тел.: +7 (8212) 39-14-61

Известно, что исследование электродинамических свойств композитных сред и функциональных материалов на их основе в рентгеновском диапазоне является перспективной проблемой. В связи с этим важно совершенствование техник, позволяющих анализировать процесс распространения электромагнитного излучения в конкретных структурах. В то же время, разработка аналитических методов ещё далека от своего завершения, поэтому значительной оказывается роль численного моделирования решения волновых уравнений. К числу методов такого моделирования относится и FDTD (Finite-Difference Time-Domain), предложенный Йи [1], важным преимуществом которого является простота реализации расчётного алгоритма. Именно это обуславливает широкое применение FDTD в самых разнообразных приложениях [2-5].

Несмотря на давнюю историю развития, метод FDTD по-прежнему привлекает внимание исследователей. В частности, обсуждаются особенности применения метода FDTD для моделирования распространения радиоволн в ионосфере Земли или электромагнитных волн терагерцового или рентгеновского диапазона в проводниках, полупроводниках или диэлектриках. В этих случаях решающую роль играет дисперсия электромагнитных волн, характер которой с математической стороны дела определяется тем, что диэлектрическая ϵ и магнитная μ проницаемости могут принимать значения, меньшие единицы. При этом обычные алгоритмы, встречающиеся в литературе по методу FDTD [1-8], не позволяют моделировать распространение света в таких средах, просто задавая значения $0 < \epsilon, \mu < 1$.

В рамках данной работы получено дисперсионное соотношение, определяющее отклонение фазовой скорости волны в сетке Йи от соответствующего значения в непрерывном случае. В результате анализа данного соотношения, установлено, что в средах с $n > 1$ (где n — это относительный показатель преломления среды) высокочастотные компоненты волнового пакета имеют тенденцию к запаздыванию, в то время как в средах с $n < 1$ эта особенность меняется на противоположную. Другими словами, в средах оптически более плотных, по сравнению с вакуумом, FDTD-расчет приводит к возникновению численной дисперсии, имеющей характер аномальной дисперсии. И наоборот, — при моделировании оптически менее плотных сред, влияние FDTD-дискретизации соответствует поведению нормальной дисперсии (при этом «красные» компоненты волнового пакета обгоняют «синие»).

Нами доказано, что при любых заданных значениях диэлектрической и магнитной проницаемостей, лежащих в области $0 < \epsilon, \mu < +\infty$, всегда можно устранить вычислительные ошибки, связанные с численной дисперсией, задавая число Куранта S (регламентирующее отношение временного и пространственного шагов сетки Йи) равным относительному показателю преломления среды. При этом

фазовая скорость волны в FDTD-сетке точно совпадает с реальным значением фазовой скорости, независимо от выбранной дискретизации длины волны. Выполнение условия $S = n$ является единственно возможным оптимальным выбором с точки зрения применения численного FDTD-алгоритма для моделирования распространения рентгеновского излучения в недиспергирующих однородных средах.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351

1. Yee K. IEEE Trans. on Ant. and Prop., 1966, 14:3.
2. Nzaio A.B.S. Open J. of Appl. Scien., 2022, 12, 912-929.
3. Yu J. et al. IEEE Trans. Indust. Inform., 2017, 13:6, 2974-2982.
4. Bakirtzis S. et al. IEEE Trans. AP. 2021, 69:6, 3389-3398.
5. Makarov P. et al. IEEE Magn. Let., 2022, 13, 2101305.
6. Schneider J.B. Understanding the Finite-Difference Time-Domain Method. www.eecs.wsu.edu/~schneidj/ufdtd, 2010. - 403.
7. Inan U.S., Marshall R.A. Numerical electromagnetics. The FDTD method, 2011. - 406.
8. Langtangen H.P., Linge S. Finite Difference Computing with PDEs: A Modern Software Approach, 2017. - 507.

ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА FeBi_2Te_4

Макеев Р.В.¹, Тарасов А.В.¹, Шикин А.М.¹

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

e-mail: st085767@student.spbu.ru, тел.: +7 (939) 3199053

Топологические изоляторы (ТИ) представляют собой класс квантовых материалов с уникальной электронной структурой, которая демонстрирует такие фундаментальные эффекты, как квантовый аномальный и спиновый эффекты Холла [1][2]. В данной работе исследуется электронная структура антиферромагнитного ТИ FeBi_2Te_4 , состоящего из семислойников [3] типа $\text{Te-Bi-Te-Fe-Te-Bi-Te}$, где магнитные атомы в соседних блоках ориентированы в противоположные стороны. Это обуславливает антиферромагнитные свойства материала и его анизотропию. Основное внимание уделено сравнению FeBi_2Te_4 с аналогичным материалом MnBi_2Te_4 [3][4], особенно с точки зрения ширины энергетической запрещенной зоны (ЭЗЗ) и локализации топологических поверхностных состояний (ТПС).

Для моделирования электронной структуры применялась теория функционала плотности (ТФП). В расчетах анализировалось, как замена атомов Fe на Mn (и наоборот) влияет на электронную структуру и локализацию ТПС.

Результаты расчетов показали, что в обоих материалах наблюдается инверсия зон в окрестности точки Γ и, несмотря на меньший магнитный момент атомов Fe по сравнению с Mn, ширина ЭЗЗ в FeBi_2Te_4 оказалась больше. Это можно объяснить значительным вкладом магнитной d-орбитали атомов Fe в формирование верхнего дираковского конуса, что оказывает влияние на ширину ЭЗЗ. Наблюдаемая инверсия зон в объемной структуре, а также формирование поверхностных состояний внутри запрещенной зоны позволяют заключить, что в электронной структуре присутствуют топологические поверхностные состояния (ТПС). Исследование спиновой текстуры показало, что спин электрона меняет поляризацию с внутриспоскостной на внеплоскостную вблизи Γ -точки, где нарушается симметрия обращения времени. Такая спиновая поляризация характерна для ТПС в магнитных ТИ. Дополнительно, исследования показали, что при растяжении в FeBi_2Te_4 могут быть индуцированы фазы вейлевского и дираковского полуметаллов [5], что не наблюдается в случае MnBi_2Te_4 .

Результаты данного исследования демонстрируют значительное влияние локализации ТПС на различия в электронной структуре и свойствах материалов FeBi_2Te_4 и MnBi_2Te_4 . Учитывая полученные данные, материал FeBi_2Te_4 является перспективным кандидатом для дальнейшего углубленного изучения, особенно в контексте топологических квантовых фаз и их возможных приложений.

Работа выполнена при поддержке Санкт-Петербургского государственного университета (грант № 95442847).

1. J. E. Hirsch. Spin Hall Effect. Phys. Rev. Lett. 83, 1999, 1834—1837.
2. Naoto Nagaosa и др., Rev. Mod. Phys. 82, 2010, 1539—1592.
3. М. М. Otrokov и др., Nature 576.7787, 2019, 416—422
4. D. Zhang и др., Phys. Rev. Lett. 122, 2019, 206401.
5. Wen-Ti Guo и др., arXiv, 2023, 2308.06716.

ВЛИЯНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ УСКОРЕННЫМИ ЭЛЕКТРОНАМИ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ГЕКСАФЕРРИТОВ БАРИЯ $\text{BaFe}_{11.12}\text{Ti}_{0.46}\text{Al}_{0.42}\text{O}_{19}$.

Маслова С.А.¹, Корх Ю.В.¹, Живулин В.Е.³, Пономарева Е.А.¹, Лобанов А.Д.¹, Сарычев М.В.², Ярмошенко Ю.М.¹, Винник Д.А.³, Иванов В.Ю.², Кузнецова Т.В.^{1,2}

¹ ИФМ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

² Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

³ Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия
e-mail: serafimamaslova@mail.ru, тел.: 8 (922) 0362456

Гексаферриты получили широкое применение в таких отраслях промышленности как электроника, постоянные магниты, магнитозаписывающие и магнитооптические устройства, а также СВЧ-электроника [1-2]. Гексаферриты М-типа имеют высокие спонтанные магнитные моменты в естественных условиях и хорошо известны как ферромагнетики с температурой Нееля около 460 °С [3]. В процессе замещения атомов модифицируются свойства материалов. Присутствие пяти неэквивалентных позиций железа в кристаллической решетке гексаферритов М-типа позволяет варьировать рабочие характеристики в широком диапазоне путем частичного замещения. В работе [4] показано, что замена ионов железа в гексаферритах бария $\text{BaFe}_{12-2x}\text{Ti}_x\text{Al}_x\text{O}_{19}$ на алюминий и титан в равных количествах приводит к уменьшению параметров решетки а и с, а также к уменьшению объема решетки, поскольку эффективный ионный радиус иона Al^{3+} меньше, чем у иона Fe^{3+} , и больше, чем у иона Ti^{3+} .

Другим способом модификации свойств материалов является облучение их ускоренными электронами. Кроме того, электронные пучки могут быть использованы для модификации свойств и изменения морфологии гексаферритов контролируемым образом в устройствах на их основе. В работе [5] было обнаружено, что обработка ферритов Mn-Zn низкоэнергетическим электронным пучком приводит к структурированию поверхности феррита, изменению элементного состава на поверхности и модификации электрических свойств. Модифицированный слой может быть использован для повышения резонансно-частотных поглощающих свойств феррита, что важно при разработке современных магнитных элементов электронной техники.

В данной работе методом рентгеновской фотоэмиссионной спектроскопии (XPS) исследована электронная структура гексаферритов бария $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$ и $\text{BaFe}_{11.12}\text{Ti}_{0.46}\text{Al}_{0.42}\text{O}_{19}$. Определены изменения электронных состояний до и после облучения материала ускоренными электронами с энергией 10 МэВ.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ №23-72-00067.

1. Vinnik D.A. et.al., J. Alloys Compd., 2020, 859, 158365.
2. Yustanti E. et.al., Coatings, 2022, 12, 1367.
3. Trukhanov A.V. et.al., J. of All. and Comp., 2018, 754, 247-256.
4. Ашурали С. И. и др., Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Химия, 2022, 14 (1), 105-113.
5. Klimov et.al., Coatings, 2023, 13(10), 1766.

ИССЛЕДОВАНИЕ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА CeCo_2P_2 МЕТОДОМ СКАНИРУЮЩЕЙ ТУННЕЛЬНОЙ МИКРОСКОПИИ

Минаев А.А.¹, Фролова А.С.^{1,2}, Столяров В.С.¹

¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия

²Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва, Россия

e-mail: minaev.aa@phystech.su, тел.: 8 (985) 2444132

В последние годы в научных кругах наблюдается повышенный интерес к 4f-соединениям, которые представляют собой яркий пример сильно коррелированных систем, где проявляются уникальные объемные явления, включая сверхпроводимость, смешанную валентность, магнитные свойства и эффект Кондо. Однако поверхностные эффекты также заслуживают внимания, хотя и остаются мало исследованными. На поверхности может происходить реконструкция и релаксация, а также возможно наблюдение поверхностного эффекта Кондо, который может отсутствовать в глубине материала. Кроме того, спектры плотности поверхностных состояний ведут себя по-своему, в зависимости от типа поверхностных окончаний, а также их расположения в объеме материала [1].

В качестве характерного примера рассматривается антиферромагнетик CeCo_2P_2 , у которого на поверхности обнаружена Кондо решётка, создаваемая атомами церия с ненулевым магнитным моментом [2]. Метод сканирующей туннельной спектроскопии отличается высокой чувствительностью к локальной электронной плотности поверхности и может применяться для выявления уникальных особенностей плотности состояний.

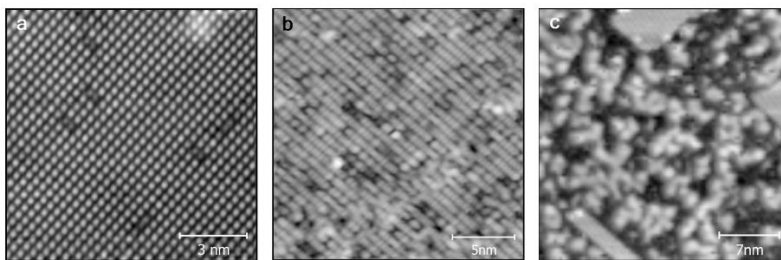


Рис. 1. Топография (а) Р-терминации (б) реконструированная Се-терминации (с) Терминации Се вблизи фосфорных островков.

Было продемонстрировано, что атомы на поверхности антиферромагнетика CeCo_2P_2 упорядочиваются тремя различными способами, как это показано на рис. 1. Существует фосфорная терминация, а также ещё два типа поверхностных окончаний, соответствующие магнитным и немагнитным атомам церия на первом атомарном слое, при этом кристаллическая решетка, состоящая из атомов Ce^{3+} , является реконструированной 2×1 . Каждому из этих состояний соответствует своё поведение спектра плотности состояний, по которому можно однозначно определить

тип атомов расположенных на поверхности. Температурно-зависимые измерения этих спектров, показанные на рис. 2а, подтвердили наличие убывающей связи между температурой и глубиной щели, обнаруженной в районе уровня Ферми для цериевой поверхности, вплоть до её полного подавления. Это доказывает, что цериевая решётка проявляет Кондо свойства, а также характерная температура Кондо находится в промежутке между 14К и 77К. По dZ/dV спектрам из осцилляций Гундлаха была получена локальная работа выхода поверхностей (рис. 2б): церию соответствует значение (2.1 ± 0.3) eV, а фосфору (3.8 ± 0.3) eV. Моделирование методом DFT показало, что происходит релаксация межслоевых расстояний между поверхностным слоем и последующим, расстояние меняется приблизительно на 10%, однако в связи с тем, что при моделировании не учитывались 4f состояния, полученные спектры плотности состояний не согласуются с экспериментальными данными.

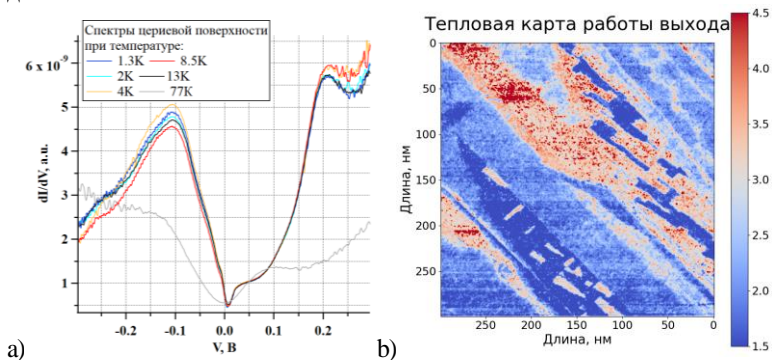


Рис. 2.(а) Спектр плотности состояний Ce-поверхности в зависимости от температуры (б) карта работы выхода CeCo_2P_2

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 23-72-30004.

1. Schulz S. [et al.]. Emerging 2D-Ferromagnetism and Strong Spin-Orbit Coupling at the Surface of Valence-Fluctuating EuIr_2Si_2 // npj Quantum Mater. 2019. V. 4(1): 26.

2. Poelchen G. [et al.]. Interlayer Coupling of a Two-Dimensional Kondo Lattice with a Ferromagnetic Surface in the Antiferromagnet CeCo_2P_2 // ACS Nano. 2022. V. 16(3). P. 3573–3581.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПЛЕНОК SiO_x С НАНОКЛАСТЕРАМИ КРЕМНИЯ, ПОЛУЧЕННЫХ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИМ ОСАЖДЕНИЕМ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ

Монид Н.В.¹, Барков К.А.¹, Терехов В.А.¹, Керсновский Е.С.¹, Польшин И.В.¹,
Минаков Д.А.²

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² ООО «СМАРТ РЭЙ», Воронеж, Россия

e-mail: monid01@mail.ru, тел.: +7 (919) 1887098

Плѐнки $\alpha\text{-SiO}_x$ с нанокластерами (ncI-Si) кремния, благодаря размерному квантованию, обладают способностью к фото- и электролюминесценции [1, 2], при этом размеры нанокластеров определяют положение максимума фотолуминесценции [3]. Это открывает технологические низкотемпературные возможности для создания множества приборов, основанных на этом эффекте. Однако содержание и размеры нанокластеров очень чувствительны к условиям их получения, что приводит к сильной дисперсии по размерам, и соответственно, сильному спектральному уширению полосы фотолуминесценции. Поэтому исследования фазового состава и фотолуминесценции диэлектрических плѐнок с нанокластерами кремния важны и актуальны.

В данной работе плѐнки $\alpha\text{-SiO}_x$ с нанокластерами кремния с различным содержанием кислорода (0,15-23 мол. %) были получены плазмохимическим осаждением из газовой фазы на подложки монокристаллического кремния Si (111) подогреваемые до $T = 265^\circ\text{C}$ в dc-магнетроне вертикального исполнения. Через боковую стенку в камеру магнетрона вводилась смесь газов $20\%\text{SiH}_4 + 80\%\text{Ar}$ с добавлением кислорода. Общее давление газовой смеси составляло $P \approx 7.5 \cdot 10^{-3}$ Торр [4]. Модуляция плазмы осуществлялась многократным (180 раз) включением и выключением магнита магнетрона. Фазовый анализ плѐнок проводился по рентгеновским эмиссионным $L_{2,3}$ спектрам, полученным на рентгеновском спектрометре монохроматоре РСМ-500 [5] при энергии первичных электронов 3 кВ, что соответствует глубине анализа равной 60 нм. Для исследования фотолуминесценции плѐнок $\alpha\text{-SiO}_x + \text{ncI-Si}$ в данной работе применялась экспериментальная установка, фиксирующая спектры люминесценции в диапазоне 400-1000 нм, с использованием оптоволоконного спектрометра USB4000-VIS-NIR, произведѐнного Ocean Optics. Данный прибор работает в диапазоне длин волн 350-1000 нм и имеет оптическое разрешение ~ 1.5 нм [6]. Люминесценция в образце возбуждалась с применением лазерного диода, с длиной волны излучения $\lambda = 405$ нм и мощностью излучения, не превышающей 20 мВт/см².

Результаты фазового анализа (рисунок 1) с последующим математическим моделированием (таблица 1) показывают, что данные плѐнки представляют собой сложный композит, содержащий в своём составе аморфный кремний $\alpha\text{-Si}$ вместе с субоксидами $\text{SiO}_{1.3}$ и $\text{SiO}_{1.7}$, а также диоксидом кремния SiO_2 . При этом с увеличением содержания кислорода в камере магнетрона от 0,15 до 23 мол. % содержание аморфного кремния в пленках SiO_x уменьшается от 100 до ~ 15 %, а также

увеличению средней степени окисления «x» субоксидной матрицы SiO_x от ~ 1.5 до ~ 1.9 .

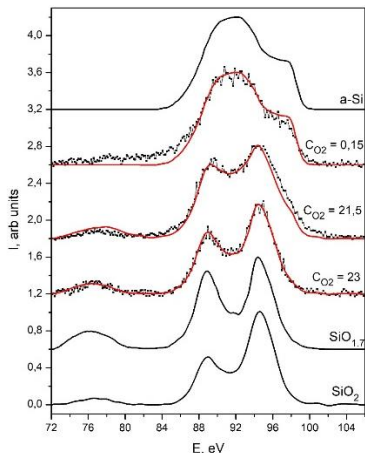


Рис. 1. Спектры УМРЭС плёнок a-SiO_x с нанокластерами кремния + математические модели спектров (красным цветом)

Таблица 1. Результаты математического моделирования спектров УМРЭС плёнок a-SiO_x + ncl-Si

| CO ₂ , mol% | a-Si, % | SiO _{1.3} , % | SiO _{1.7} , % | SiO ₂ , % | «x» in SiO _x |
|------------------------|---------|------------------------|------------------------|----------------------|-------------------------|
| 0.15 | 100 | - | - | - | - |
| 21.5 | 30 | 35 | - | 35 | 1.65 |
| 23 | 10 | - | 40 | 50 | 1.87 |

Из результатов анализа спектров фотолюминесценции (рисунок 2) видно, что во всех плёнках наблюдается как минимум два максимума интенсивности в области энергий ~ 1.9 - 2.3 эВ, что говорит об образовании в пленках нанокластеров ncl-Si разного размера (от 2 до 3,5 нм) [3]. При этом как видно из рисунка 2 (б), основной вклад в ФЛ образца с наименьшим содержанием кислорода вносит излучение дефектов в оксидной матрице.

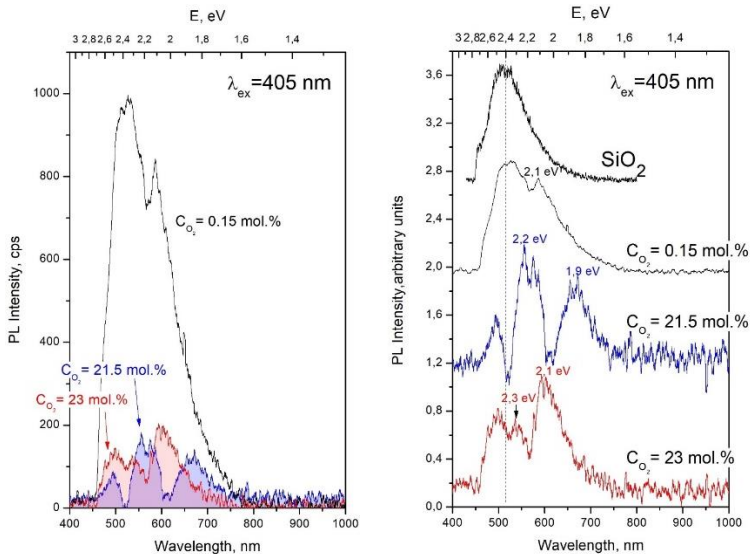


Рис. 2. ФЛ спектры плёнок $a\text{-SiO}_x$ с нанокластерами кремния, полученных при различном содержании кислорода в камере магнетрона; а) в масштабе абсолютной интенсивности ФЛ; б) отнормированные спектры и спектр люминесценции дефектов SiO_2 .

1. Терехов В. А. и др. Состав и оптические свойства аморфных пленок $a\text{-SiO}_x\text{H}$ с нанокластерами кремния //Физика и техника полупроводников. – 2016. – Т. 50. – №. 2. – С. 212-217.

2. Pavesi L., Turan R. (ed.). Silicon nanocrystals: fundamentals, synthesis and applications. – John Wiley & Sons, 2010.

3. Ledoux G. et al. Photoluminescence of size-separated silicon nanocrystals: Confirmation of quantum confinement //Applied Physics Letters. – 2002. – Т. 80. – №. 25. – С. 4834-4836.

4. Ундалов Ю. К., Теруков Е. И., Трапезникова И. Н. Формирование ncl-Si в аморфной матрице $a\text{-SiO}_x\text{H}$: Н, расположенной вблизи анода и на катоде, с помощью модулированной по времени DC-плазмы с $(\text{SiH}_4\text{-Ar-O}_2)$ -газовой фазой ($\text{CO}_2 = 21.5$ мол.%) //Физика и техника полупроводников. – 2019. – Т. 53. – №. 11. – С. 1547-1556.

5. Terekhov V. A. et al. Determination of the phase composition of surface layers of porous silicon by ultrasoft X-ray spectroscopy and X-ray photoelectron spectroscopy techniques //Journal of electron spectroscopy and related phenomena. – 2001. – V. 114. – P. 895-900.

6. Малогабаритные оптоволоконные спектрометры FLAME-T-UV-VIS и FLAME-T-VIS-NIR [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.oceanoptics.ru/spectrometers/161-spec-usb4000-uv-vis.html>

КОМПОЗИТНЫЕ НАНОКОНТЕЙНЕРЫ НА ОСНОВЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ И ЗОЛОТА ДЛЯ КОНТРОЛЯ ЗАГРУЗКИ И ВЫХОДА ЛЕКАРСТВА МЕТОДОМ ГКР-СПЕКТРОСКОПИИ

Назаровская Д.А.¹, Васильева М.И.¹, Самсонова Ж.В.¹, Осминкина Л.А.^{1,2}

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

² Институт биологического приборостроения РАН, Пуцино, Россия

e-mail: nazarovskaia.da22@physics.msu.ru, тел.: +7 (996) 7634975

В настоящее время интенсивно развиваются методы спектроскопии единичных молекул для биоприменений. Сегодня такие подходы позволяют с помощью оптического возбуждения наблюдать за малым количеством вещества даже в сложных, многокомпонентных биологических средах. Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) идеально подходит для биомедицинской диагностики за счет того, что метод высокочувствительный и неинвазивный. Спектральная идентификация исследуемого образца основана на изменении частоты рассеяния света в зависимости от частот колебаний молекул в веществе (комбинационное (рамановское) рассеяние). Эффект ГКР основан на явлении локализованного поверхностного плазмонного резонанса (ЛППР), где возбуждение локализованных плазмонов возникает на нанощероховатой поверхности благородных металлов (золото, серебро, медь и т.д.).

Наночастицы на основе пористого кремния (pSi НЧ) широко распространены в наномедицине в том числе за счет своей особенности растворяться до нетоксичной кремниевой кислоты в среде живого организма [0]. Поэтому pSi НЧ исследуются как эффективные наноконтейнеры для доставки лекарств. Биодegradация загруженных доксорубицином pSi НЧ и кинетики релиза лекарства внутри раковых клеток методом рамановской спектроскопии были впервые успешно продемонстрированы в [0]. Также pSi НЧ хорошо переносятся и даже могут сократить токсическое воздействие на клетки сердца при доставке противоопухолевого препарата сунитиниба, вызывающего кардиологические заболевания как побочный эффект [0]. Тем не менее, ожидается, что модификация поверхности pSi НЧ наночастицами Au (AuНЧ) позволит добиться усиления рамановского сигнала загруженного лекарства за счет явления ЛППР.

В ходе работы отработана методика изготовления нового композитного материала Au-pSi НЧ. Изучены физико-химические характеристики полученных Au-pSi НЧ с помощью методов динамического рассеяния света (ДРС), инфракрасной (ИК) спектроскопии, просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Размер получаемых композитных наночастиц составляет около 150 нм. Отработана методика загрузки лекарства (сунитиниб) в поры Au-pSi НЧ. Исследована ГКР-активность pSi НЧ. На рис. 1 представлен спектр лекарства сунитиниб, загруженного в наночастицы пористого кремния и в полученные композитные Au-pSi НЧ. Характерными для сунитиниба являются полосы на 1320 см^{-1} и 1592 см^{-1} , что соответствует колебаниям C-N и амид III связей, соответственно. Показано, что за счет Au-pSi НЧ наблюдается значительное усиление сигнала лекарства.

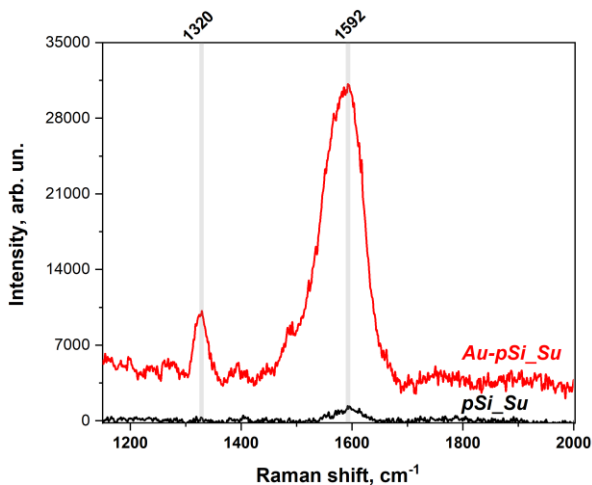


Рисунок 1 – Рамановский спектр лекарства сунитиниб, загруженного в наночастицы пористого кремния (черный), и в наночастицы пористый кремний-золото (красный)

Полученные результаты подчеркивают перспективу применений композитных наноструктур на основе наночастиц пористого кремния и золота для исследования загрузки и выхода лекарства из наноконтейнеров методом ГКР.

Исследование поддержано РНФ № 24-15-00137, работа Д.А. Назаровской поддержана Фондом развития теоретической физики и математики «БАЗИС» 23-2-2-18-1.

1. J.-H. Park, et al. Biodegradable luminescent porous silicon nanoparticles for in vivo applications // Nature Materials, vol. 8, pp. 331–336, 2009.

2. P.V. Maximchik, et al. Biodegradable Porous Silicon Nanocontainers as an Effective Drug Carrier for Regulation of the Tumor Cell Death Pathways // ACS Biomater. Sci. Eng., vol. 5 (11), pp. 6063-6071, 2019.

3. Tolstik, E., et al. Raman and fluorescence micro-spectroscopy applied for the monitoring of sunitinib-loaded porous silicon nanocontainers in cardiac cells. // Front. pharmacol., vol. 13, pp. 962763, 2022.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МАГНИТНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ НА ОСНОВЕ MnBi_2Te_4

Наумов А.А.¹

¹ *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), г. Долгопрудный, Россия
e-mail: arseni.naumov@gmail.ru, тел.: 8 (916) 2046383*

Во многих аспектах современной физики конденсированного состояния возникает необходимость создания многофункциональных материалов, имеющих уникальные электронные свойства. К таким материалам, в частности, относятся трехмерные топологические изоляторы (ТИ), которые представляют собой узкозонные полупроводники имеющие топологически-защищённые поверхностные состояния (ТПС) с дисперсией конуса Дирака на границе с тривиальным изолятором. Введение в структуру ТИ магнитного компонента приводит к возникновению запрещенной зоны в точке Дирака, вследствие обменного взаимодействия. Для таких материалов предсказано наличие ряда интересных эффектов, в частности квантового аномального эффекта Холла [1], что даёт перспективу реализации таких материалов в спинтронных, магнетоэлектрических приборах, а также для топологически-защищённых квантовых вычислений.

Особый интерес привлекают собственные магнитные ТИ (СМТИ), в которых магнитные атомы упорядоченно занимают выделенные кристаллографические позиции. Одним из представителей СМТИ является MnBi_2Te_4 [2]. MnBi_2Te_4 состоит из семислойных пакетов связанных Ван-дер-Ваальсовыми связями, в центре которых расположены атомы марганца. При этом, ниже температуры Нееля $T_N=24.5\text{K}$, внутри слоя устанавливается дальний ферромагнитный порядок, а между слоями – антиферромагнитный. MnBi_2Te_4 характеризуется электронным типом легирования, связанным с наличием собственных дефектов, который приводит к значительному подавлению вклада ТПС в сравнении с объёмными в транспорте электронов. Для подавления вклада объёмной проводимости, зонная структура топологических изоляторов должна быть модифицирована так, чтобы уровень Ферми и точка Дирака располагались в середине фундаментальной запрещённой зоны. Основным подходом к решению этой задачи является оптимизация элементарного и дефектного состава твёрдых растворов с общей формулой $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$. Поскольку соединения с $x=0$ и 1 являются антиферромагнитными топологическими изоляторами, обладающими соответственно n и p типом проводимости, путём плавного изменения мольной доли MnSb_2Te_4 возможно получение электронейтрального образца.

В рамках данной работы, при помощи модифицированного метода Бриджмена были синтезированы образцы составов с $x=0, 0,3, 0,38, 0,65, 0,91, 1$. Электронная структура поверхности естественного скола (111) R монокристаллов изучена методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (Рис.1). Была установлена дисперсия состояний зоны проводимости и валентной зоны. Обнаружено, что в области мольных долей $x<0,3$ и $x>0,38$ образцы представляют собой вырожденные полупроводники n и p типа соответственно, а при $x = 0,3-0,38$

находится состав, близкий к точке электронейтральности, в котором может быть достигнута близость точки Дирака и уровня Ферми (Рис. 2 а,б). При этом, замена висмута на сурьму не приводит к появлению новых примесных состояний вблизи уровня Ферми.

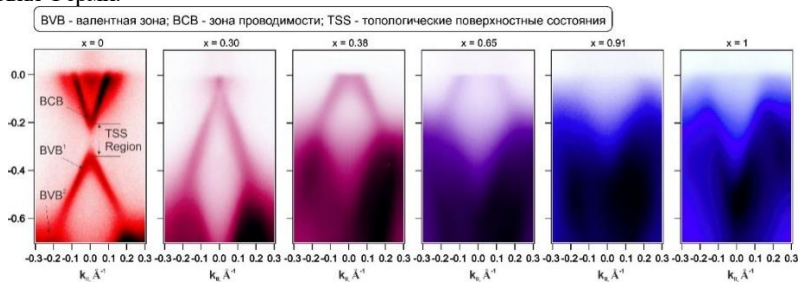


Рис. 1. Данные ФЭСУР для $\text{Mn}(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)_2\text{Te}_4$ с $x=0, 0,3, 0,38, 0,65, 0,91, 1$.

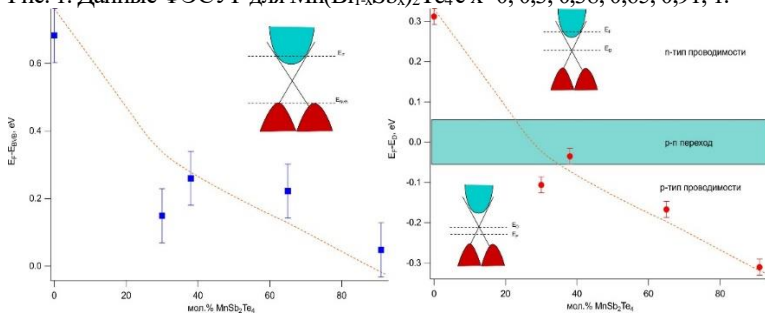


Рис. 2. Зависимости от составов а) Разности энергий уровня Ферми и дна валентной зоны б) Разности энергий уровня Ферми и положения точки Дирака.

Работа выполнена при поддержке поддержке РФФ (грант №23-72-00020).

1. Rui Yu, Science, 2010, 329, 61-64.
2. Otrokov, M.M., Klimovskikh, I.I., Bentmann, H., Nature, 2019, 576, 416–422.

ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИТНОГО ЭЛЕКТРОДНОГО МАТЕРИАЛА Ni- PANI@GO

Недоедкова О.В., Яловега Г.Э.

Южный Федеральный Университет, г. Ростов-на-Дону
e-mail: nedoedkova@sfedu.ru, тел.: 8 (961) 3309593

Особую роль в создании нанокompозитных электродных материалов для суперконденсаторов играет характер корреляционных связей в рамках фундаментального треугольника состав-структура-свойство. Синтез новых материалов с электронной и ионной проводимостью требует фундаментального понимания принципов работы электродных материалов, обеспечиваемого как экспериментальными, так и теоретическими исследованиями [1, 2].

В работе были исследованы структура и свойства композитного материала на основе полианилина (PANI), оксида графена (GO) и никеля: PANI@GO и Ni-PANI@GO.

Исследования порошковых образцов методами SEM (рис. 1) и Raman спектроскопии показали, что нановолокна PANI обвиваются вокруг агломерированных наночастиц GO, причем GO интегрируется в PANI с уменьшением количества слоев и межплоскостных расстояний, что может быть связано с уменьшением степени окисления графена.

Данные UV-vis спектроскопии позволили определить значение ширины запрещенной зоны, которая у образца PANI@GO уменьшилась по сравнению с PANI. При легировании никелем ширина запрещенной зоны Ni-PANI@GO увеличивается по сравнению с PANI@GO, что можно объяснить уменьшением концентрации носителей заряда и мостикового зазора, разделяющего валентную зону и зону проводимости [3].

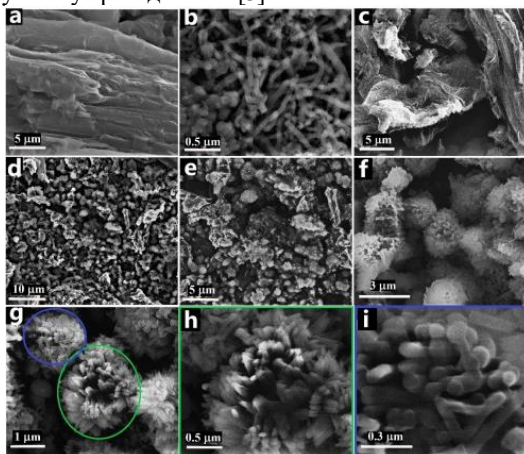


Рис. 1 SEM изображения порошковых образцов (a) GO, (b) PANI, (c) PANI@GO и (d-i) Ni-PANI@GO

Исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 23-22-00459 в Южном Федеральном Университете. Авторы выражают благодарность Мясоедовой Т.Н. за предоставление образцов для исследования и Константинову А.С. за регистрацию спектров комбинационного рассеяния.

1. L. Kong, J. Lang, M. Liu, Y. Luo, L. Kang, Facile approach to prepare loose-packed cobalt hydroxide nano-flakes materials for electrochemical capacitors, J. Power Sources. 194 (2009) 1194-1201.

2. J. Lang, L. Kong, W. Wu, M. Liu, Y. Luo, L. Kang, A facile approach to the preparation of loose-packed Ni(OH)₂ nanoflake materials for electrochemical capacitors, J. Solid State Electrochem. 13 (2009) 333-340.

3. A.S. Hassanien, A.A. Akl, Effect of Se addition on optical and electrical properties of chalcogenide CdSSe thin films, Superlattice. and Microst. 89 (2016) 153-169.

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ИОНОВ Sr^{2+} НА МЕЖПЛОСКОСТНЫЕ РАССТОЯНИЯ В ПЕРОВСКИТОПОДОБНЫХ КРИСТАЛЛАХ ХРОМИТОВ ЛАНТАНА И ГАДОЛИНИЯ

Немых Я.М.¹, Кострюков В.Ф.¹

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия
e-mail: yaromir0202@gmail.com, тел.: 8 (960) 125-34-92

Исследование кристаллической структуры – это основа изучения твердых веществ. Тип решетки, ее параметры и межплоскостные расстояния, а также природа элементов входящих в соединение оказывают влияние как на физические, так и на химические свойства материала.

Структурный тип перовскита исследован достаточно подробно, однако широкое разнообразие соединений и тип кристаллической решетки позволяют производить различные модификации. Внесение атомов посторонних элементов, создание дефектов и прочие манипуляции позволяют оказывать значительное влияние на структуру, тем самым изменяя физические свойства [1].

Исследование хромитов лантана и гадолиния является одним из актуальных направлений изучения кристаллических материалов. Для повышения их эффективности как газовых сенсоров было произведено допирование ионами Sr^{2+} в количестве 5, 10 и 15%.

Методом рентгеновской дифракции [2] на дифрактометре Thermo ARL X'TRA оценено влияние допанта на параметры кристаллической решетки (Рис. 1 и 2).

Параметры кристаллических решеток образцов представлены в таблицах 1 и 2.

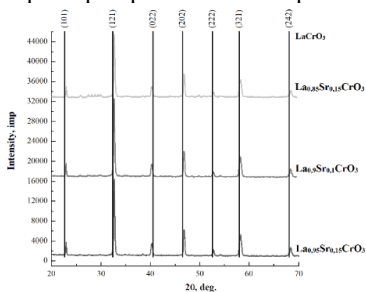


Рис.1. Сравнение рентгеновских дифрактограмм хромитов лантана допированных ионами Sr^{2+} с чистым хромитом лантана.

Таблица 1. Сравнение межплоскостных расстояний хромитов лантана допированных ионами Sr^{2+} с чистым LaCrO_3 .

| Образец | Сравнение значений d_{hkl} допированных образцов с чистым | | | | | | |
|--|---|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| | (101) | (121) | (002) | (202) | (222) | (321) | (242) |
| LaCrO_3 | 3,826 | 2,697 | 2,233 | 1,914 | 1,697 | 1,561 | 1,349 |
| $\text{La}_{0.95}\text{Sr}_{0.05}\text{CrO}_3$ | 3,871 | 2,741 | 2,233 | 1,936 | 1,734 | 1,587 | 1,371 |
| $\text{La}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{CrO}_3$ | 3,875 | 2,741 | 2,244 | 1,939 | 1,735 | 1,581 | 1,371 |
| $\text{La}_{0.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CrO}_3$ | 3,869 | 2,739 | 2,234 | 1,938 | 1,734 | 1,580 | 1,368 |

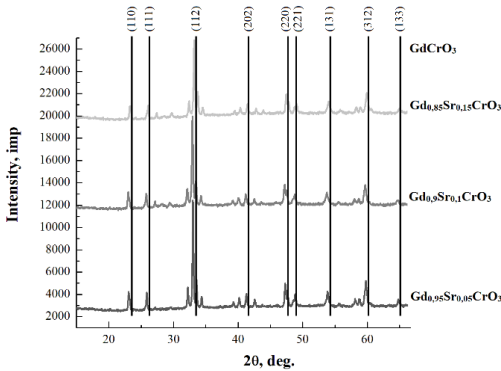


Рис.2. Сравнение рентгеновских дифрактограмм хромитов гадолия допированных ионами Sr^{2+} с чистым хромитом гадолия.

Таблица 2. Сравнение межплоскостных расстояний хромитов гадолия допированных ионами Sr^{2+} с чистым GdCrO_3 .

| Образец | Сравнение значений допированных образцов с чистым d_{hkl} , Å | | | | | | | | |
|--|---|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| | (110) | (111) | (112) | (202) | (220) | (221) | (311) | (312) | (333) |
| GdCrO_3 | 3,825 | 3,418 | 2,697 | 2,283 | 1,914 | 1,856 | 1,697 | 1,542 | 1,434 |
| $\text{Gd}_{0.98}\text{Sr}_{0.02}\text{CrO}_3$ | 3,821 | 3,421 | 2,698 | 2,177 | 1,914 | 1,868 | 1,697 | 1,542 | 1,434 |
| $\text{Gd}_{0.9}\text{Sr}_{0.1}\text{CrO}_3$ | 3,822 | 3,422 | 2,698 | 2,177 | 1,915 | 1,857 | 1,697 | 1,543 | 1,435 |
| $\text{Gd}_{0.95}\text{Sr}_{0.05}\text{CrO}_3$ | 3,821 | 3,421 | 2,699 | 2,178 | 1,915 | 1,859 | 1,697 | 1,543 | 1,435 |

Подводя итоги, необходимо отметить, что в силу схожести ионных радиусов Sr^{2+} , La^{3+} и Gd^{3+} произошло встраивание ионов Sr^{2+} в кристаллические решетки LaCrO_3 и GdCrO_3 о чем говорит отсутствие примесных фаз. Ионы Sr^{2+} , встроившиеся в кристаллическую решетку хромита лантана, влияют на межплоскостные расстояния, так как ионный радиус La^{3+} составляет 1,5 Å, а Sr^{2+} – 1,04 Å. В случае с хромитом гадолия заметных изменений нет, что связано со схожестью ионных радиусов Sr^{2+} (1,04 Å) и Gd^{3+} (0,96 Å).

Благодарность Центру коллективного пользования научным оборудованием Воронежского государственного университета (ЦКПНО ВГУ) за возможность проведения исследований.

1. Fergus J. W. Perovskite oxides for semiconductor-based gas sensors / J. W. Fergus // Sensors and Actuators B. – 2007. – Vol. 123. – P. 1169–1179.

2. Уманский Я. С. Рентгенография металлов и полупроводников / Я. С. Уманский. – Москва : Металлургия, 1969. – 496 с.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ПОДЛОЖЕК НА СТРУКТУРНОЕ СОВЕРШЕНСТВО И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК Cd_3As_2

Нечушкин Ю.Б.¹, Маренкин С.Ф.²

¹ *Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», Москва, Россия*

² *Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, Россия*

e-mail: u.nechushkin@mail.ru, тел.: +7 (989) 507-75-73

На сегодняшний день внимание ученых привлекают труды по получению материалов с помощью нанотехнологий. В частности, для получения тонких пленок Cd_3As_2 – известного Дираковского полуметалла – широко применяется метод вакуумно-термического напыления, что объясняется конгруэнтным характером испарения арсенида кадмия [1]. Здесь примечательными являются одни из последних работ по тонким пленкам Cd_3As_2 [2, 3], где показано влияние различных температур отжига на структурное совершенство плёнок. Однако в данных работах практически отсутствовали данные о магнитных свойствах тонких пленок, в частности их магнитосопротивление. Исходя из этого, целью данной работы является синтез тонких пленок Cd_3As_2 , а также исследование их состава, структуры и транспортных свойств.

Для оптимизации технологических режимов синтеза произведен расчет скорости напыления. Расчет проводили на основе термодинамических свойств скорости роста пленок для молекулярного режима массопереноса [4]. Расчетная и экспериментальные скорости роста хорошо коррелировали друг с другом и составляли 15.33 и 15.51 нм/с при 800 °С соответственно.

Результаты рентгеновского фазового анализа и атомно-силовой микроскопии показали увеличение размера среднего кристаллитов с 65 до 105 нм, проводимости и подвижности носителей заряда при увеличении температур подложек с 25 до 175 °С во время напыления. Результаты транспортных измерений показали, что кривые магнитного сопротивления имели линейный характер зависимости, связанной с классическим увеличением вероятности рассеяния носителей заряда ввиду воздействия силы Лоренца и параболическим характером при более высоких магнитных полях. Увеличение температуры подложки приводит к значительному росту магнитосопротивления, что показано на рисунке 1.

Представленные данные демонстрируют возможность управления транспортными свойствами путем изменения технологических условий синтеза, что даёт практическую возможность использования плёнок в качестве датчиков магнитного поля.

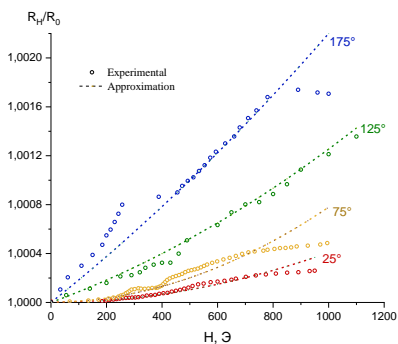


Рис. 1. Магнитосопротивление плёнок Cd₃As₂, напыленных при 25, 75, 125 и 175 °С

Работа была выполнена благодаря финансовой поддержке РФФ № 21-73-20220.

1. Маренкин С.Ф., Трухан В.М. Фосфиды, арсениды цинка и кадмия // Минск: Вараскин А.Н. 2010. 224 с.

2. Жалилов Н.С., Саньгин В.П., Юрьев Г.С., Маренкин С.Ф., Лазарев В.Б. Ориентированные пленки полупроводниковых соединений Zn₃As₂ и Cd₃As₂ на сапфировых подложках // Журнал неорганической химии. 1992. Т. 37, № 9. С. 1950–1954.

3. Kochura A.V., Aung Zaw Htet, Zakhvalinsky V.S., Pilyuk E.A., Kochura E.P., Ril A.Yu., Emelaynov V.M. Structure and Properties of Thin Magnetron Films of Cadmium Arsenide on Various Substrates // Proceedings of the Southwest State University. Series: Engineering and Technology. 2023. V.13. P. 201–221. <https://doi.org/10.21869/2223-1528-2023-13-2-201-221>

4. Крапухин В.В., Соколов И.А., Кузнецов Г.Д. Технология материалов электронной техники. Теория процессов полупроводниковой технологии. М.: «МИСИС». 2-е издание. 1995. 493 с.

EXAFS-ИССЛЕДОВАНИЯ ПЛЕНОК ОКСИДА ЖЕЛЕЗА

Р.Г. Валеев¹, А.А. Петков^{1,2}, В.В. Кривенцов³

¹⁾ УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск

²⁾ Удмуртский государственный университет, Ижевск

³⁾ ЦКП "СКИФ" ИК СО РАН, Кольцово

Тонкие пленки оксидов металлов широко описываются в литературе благодаря их фотохимической стабильности. Тонкопленочные оксидные покрытия на основе переходных металлов IV, V групп широко используются в производстве микроэлектронных и оптических компонентов, защитных и биологически совместимых покрытий [1].

Тонкие пленки оксида железа (III) обладают потенциальными преимуществами [2] для фотоэлектрохимического получения водорода. Он стабилен в водных растворах с pH выше 3, имеет подходящую ширину запрещенной зоны 2-2,2 эВ, что обеспечивает поглощение солнечного света на 40%.

Магнетит (Fe_3O_4) использовался на протяжении тысячелетий в качестве одного из важных магнитных материалов. В частности, модифицированные тонкие пленки Fe_3O_4 обладают превосходными электрическими и магнитными свойствами по сравнению с чистыми пленками [3].

Но условия получения различных фаз оксида железа необходимо контролировать с помощью различных методов структурного и химического анализа и, таким образом, основной целью данного исследования является изучение локального атомного строения в зависимости от условий окисления магнетронно-осажденных пленок железа.

Визуализация морфологии поверхности окисленных на воздухе при различных температурах магнетронно-осажденных пленок железа проводилась с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ), для выявления полученных фаз оксидов железа использовался рентгено-структурный анализ (РСА). Распределение различных форм оксидов железа по толщине пленок проводилось методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Локальная атомная структура исследована методом EXAFS-спектроскопии.

Спектры XANES/EXAFS (Fe-K) исследованных образцов были записаны на УНУ станция EXAFS спектроскопии (СЦСТИ, Новосибирск). Состояние и локальная атомная структура в образцах исследовались методом XAFS (XANES/EXAFS) спектроскопии по выходу флюоресценции с селективной отсечкой фона. Установлены длины межатомных связей и соответствующие координационные числа. Данные, полученные различными методами хорошо согласуются между собой. Подробно рассмотрены возможные варианты структурных моделей.

Работа выполнена в рамках государственного задания Отдела ФХП УдмФИЦ УрО РАН (№ 121030100002-0).

Работа была частично поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания для ЦКП "СКИФ" ИК СО РАН (FWUR-2024-0040).

Также работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351 в части развития методик рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

1) Rest, A. Polyene and linearly conjugated dyes. In Coyle, J. D., Hill, R. R. and Roberts, D. R. (eds.), *Light, Chemical Change and Life: A Source Book in Photochemistry*, Milton Keynes, Open University, 1982.

2) Kay A., Cesar I., Gratzel M. New Benchmark for Water Photooxidation by Nanostructured α -Fe₂O₃ Films // *Journal of the American Chemical Society*. – 2006. – Vol. 128. - № 49. – P. 15714 – 15721.

3) Wang, X., Liao, Y., Zhang, D., Wen, T., & Zhong, Z. A review of Fe₃O₄ thin films: Synthesis, modification and applications // *Journal of Materials Science & Technology*. – 2018. - Vol.34. – № 8. - P. 1259–1272.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ СИЛ ОСЦИЛЛЯТОРОВ РЕНТГЕНОВСКИХ ПЕРЕХОДОВ В ОБЛАСТИ NEXAFS C1s-КРАЯ ПОГЛОЩЕНИЯ НОРГ

Петрова О.В., Некипелов С.В., Бакина К.А., Сивков В.Н.

*ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, Россия
e-mail: teiou@mail.ru, тел.: 8 (909) 1225201*

Целью работы является экспериментальное измерение спектральных зависимостей сечений поглощения в абсолютной шкале и определение из них распределения сил осцилляторов $C1s \rightarrow \sigma^*$ и $C1s \rightarrow \pi^*$ рентгеновских переходов в области NEXAFS $C1s$ -края поглощения высокоориентированного пиролитического графита (high oriented pyrolytic graphite, НОРГ). Измерение $C1s$ NEXAFS-спектров проводилось с использованием линейно-поляризованного синхротронного излучения (СИ) российско-немецкой канала (RGLB) BESSY II и станции НАНОФЭС КИСИ-Курчатов путем регистрации сигнала полного электронного выхода (TEY) при нормальном и скользящем углах падения СИ на поверхность исследуемого образца.

Спектральные зависимости сечения поглощения $\sigma(E)$ в абсолютной шкале, а также определяемые из них распределения сил осцилляторов f в области NEXAFS являются фундаментальными параметрами, определяющими свойства квантово-механической системы (атома, молекулы, кластера, квазимолекулы) и характеризующими процесс взаимодействия рентгеновского излучения с веществом. Эти параметры связаны соотношением:

$$\sigma(E) = 109.8(\text{Мб} \cdot \text{эВ}) \cdot df/dE, \quad (1)$$

которое позволяет определить распределение сил осцилляторов из экспериментальной спектральной зависимости сечения поглощения $\sigma(E)$, выраженной в мегабарнах [1].

Вследствие высокой ориентации графеновых плоскостей и следовательно, π^* - и σ^* -орбиталей в НОРГ использование СИ с высокой степенью линейной поляризации $P \approx 0.8$ позволяет проводить идентификацию элементов NEXAFS и измерения сил осцилляторов рентгеновских переходов отдельно для π^* - и σ^* -состояний.

В данной работе парциальные сечения поглощения $\sigma(E)$ были измерены для различных углов падения синхротронного излучения $\theta = 90^\circ, 70^\circ, 50^\circ, 40^\circ, 30^\circ, 20^\circ$ относительно поверхности образца (рис.1). При этом спектральная зависимость сечения поглощения может быть представлена в следующем виде:

$$\sigma_\theta(E) = P[A(E) - B(E)] \cos^2 \theta + B(E) + \sigma_{iz}(E), \quad (2)$$

где $A(E)$ и $B(E)$ – абсолютные сечения поглощения для $C1s \rightarrow \sigma^*$ и $C1s \rightarrow \pi^*$ переходов соответственно, а $\sigma_{iz}(E)$ – изотропная составляющая сечения поглощения. В случае нормального падения СИ ($\theta = 90^\circ$) осуществляются только $C1s \rightarrow \sigma^*$ электронные переходы, при уменьшении угла падения вклад $C1s \rightarrow \sigma^*$ -переходов уменьшается, а $C1s \rightarrow \pi^*$ -переходов – увеличивается. Измерение

сечения поглощения при нормальном угле падения $\sigma_{\perp}(E)$ позволяет определить вклад $B(E)$ с учетом изотропной составляющей:

$$\sigma_{\perp}(E) = B(E) + \sigma_{iz}(E), \quad (3)$$

при этом сечение поглощения, измеренное при скользящем угле падения $\sigma_{\parallel}(E)$, будет определяться формулой:

$$\sigma_{\parallel}(E) = A(E) + \sigma_{iz}(E) = \frac{\sigma_{\theta}(E) - \sigma_{\perp}(E)}{P \cdot \cos^2 \theta} + \sigma_{\perp}(E). \quad (4)$$

Из представленных выше выражений (3) и (4) и приведенных к абсолютной шкале в мегабарнах спектральных зависимостей сечений поглощения, измеренных при нормальном $\sigma_{\perp}(E)$ и скользящем углах падения $\sigma_{\parallel}(E)$ были найдены абсолютные сечения поглощения $A(E)$ для $C1s \rightarrow \sigma^*$ и $B(E)$ для $C1s \rightarrow \pi^*$ переходов, при этом анизотропная составляющая $\sigma_{iz}(E)$ определялась путем линейной экстраполяции из коротковолновой части спектра (370 – 400 эВ). Спектральные зависимости парциальных сечений поглощения для $C1s \rightarrow \sigma^*$ и $C1s \rightarrow \pi^*$ переходов в НОРГ за вычетом вклада изотропной составляющей $\sigma_{iz}(E)$ и разложенные на отдельные полосы поглощения дисперсионными функциями представлены на рис.2 и рис.3., соответственно. Далее путем интегрирования отдельных полос поглощения, согласно формуле (1), были вычислены силы осцилляторов рентгеновских переходов.

Приведение спектральных зависимостей сечения поглощения к абсолютной шкале проводилось согласно методике, описанной в [2], с использованием тонкопленочного Ti-фильтра для подавления и оценки рассеянного фона и коротковолнового излучения кратных порядков дифракции.

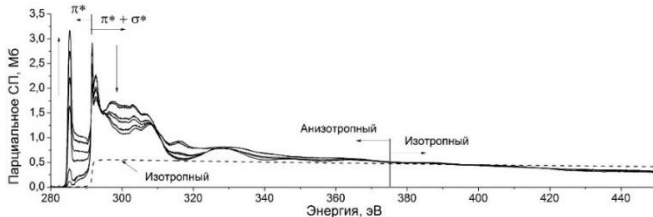


Рис.1. Спектральные зависимости парциальных сечений поглощения НОРГ в абсолютной шкале при $\theta = 90^{\circ}, 70^{\circ}, 50^{\circ}, 40^{\circ}, 30^{\circ}, 20^{\circ}$ углах падения СИ.

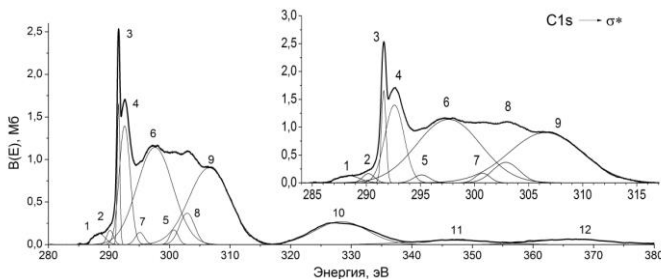


Рис.2. Спектральные зависимости парциальных сечений поглощения $C1s \rightarrow \sigma^*$ переходов в НОРГ за вычетом вклада изотропной составляющей $\sigma_{iz}(E)$

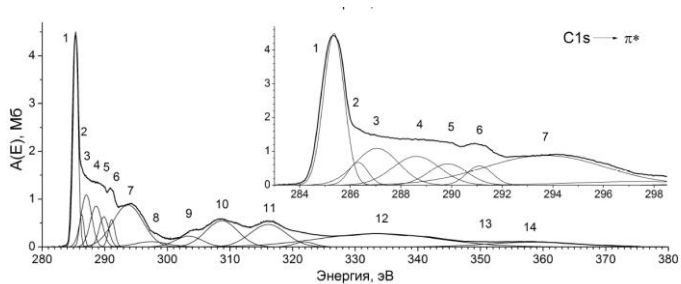


Рис.3. Спектральные зависимости парциальных сечений поглощения $C1s \rightarrow \pi^*$ переходов в HOPG за вычетом вклада изотропной составляющей $\sigma_{iz}(E)$

Работа выполнена при поддержке «Министерства науки и высшего образования России» в рамках соглашения N 075-15-2021-1351.

1. Stoehr, J., NEXAFS Spectroscopy, Springer, Berlin, 1992.
2. Sivkov D. *et al.*, Nanomaterials, 2020, 10, 374.

ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КРАСИТЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ АЗОЛОТРИАЗИНОВ С БЕЛКАМИ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ

Плешкова М.Н., Черных Ю.А., Вандышев Д.Ю., Антипов С.С.

*ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, 394018, Университетская площадь, 1
e-mail: mpleskova14@gmail.com, тел.: 8 (910) 348-78-27*

Флуоресцентные красители - обширный класс органических соединений, широко используемых в биофизических исследованиях для аналитических целей. Особенно актуально использование таких красителей в исследовании веществ или материалов, не обладающих способностью флуоресцировать, или в случаях, когда эта способность выражена слабо. Благодаря использованию искусственных флуорофоров в флуоресцентной микроскопии или спектроскопии возможно оценить изменения конформации биомакромолекул, а также исследовать молекулярные механизмы возникновения и развития патологических процессов, действие на организм биологически активных веществ и лекарственных препаратов. Флуоресцентные красители широко используются в исследованиях для обнаружения бактерий и патогенных микроорганизмов. В связи с этим, важно изучать специфичность взаимодействия новых флуоресцентных красителей с различными белками, чтобы выяснить, могут ли они быть полезны для этих целей.

Нами было проведено электрофоретическое фракционирование растворов лизоцима в присутствии флуоресцентных красителей, для чего был использован 15%-ный полиакриламидный гель. Визуализацию эксперимента проводили при освещении геля ультрафиолетом с длиной волны 312 нм, что позволило идентифицировать области миграции окрашенных био-макромолекул. Полученные данные свидетельствуют о том, что красители 4, 6, 7, 12, 14 и 16 имеют ярко выраженный сигнал флуоресценции в низкомолекулярной области, помимо этого присутствует полоса, соответствующая молекулярной массе около 15 кДа. Таким образом, полученные данные свидетельствуют о возможной специфичности флуоресцентных красителей к лизоциму, учитывая наличие полосы, соответствующей ему. На следующем этапе было использовано электрофоретическое фракционирование в 12,5%-ном полиакриламидном геле, в присутствии белкового лизата, полученного из клеток *E. coli* C41XPY62, с концентрацией 0,1 мг/мл. Полученные данные также свидетельствуют о наличии сигналов флуоресценции на геле для 2, 4, 6, 7, 10, 12, 14 и 16 зондов, но при этом эти данные не сильно коррелируют с полученными данными при окрашивании Coomassie R-250, поэтому мы повторили эксперимент с высокой концентрацией бактериального белка (1 мг/мл). Полученные данные также коррелируют с результатами, полученными на предыдущем этапе, но не было зарегистрировано полосы миграции, соответствующей молекулярной массе 10-18 кДа. Поэтому можно сделать некоторое предположение о том, что данные флуоресцентные красители могут взаимодействовать с белками эукариот.

Затем, нами было проведено измерение размеров частиц, присутствующих как в чистом растворе красителей, так и в присутствии лизоцима, при помощи метода

динамического рассеяния света. Полученные результаты свидетельствуют о том, что размер молекулы лизоцима составил 3,7 нм при концентрации 0,1 мг/мл, что коррелирует с литературными данными. Добавление красителей в целом приводило к уменьшению размера частиц, присутствующих в растворе, за исключением красителя номер 10, присутствие которого приводило к формированию частиц размером 321,8 нм, что, скорее всего, вызвано агрегацией молекул белка в присутствии данного красителя.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СОДЕРЖАНИЯ МЕДИ НА СТРУКТУРУ И ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ПЛЕНОК Cu-Si, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ИОННО-ЛУЧЕВОГО РАСПЫЛЕНИЯ

Польшин И.В.¹, Барков К.А.¹, Керсновский Е.С.¹, Терехов В. А.¹, Ивков С.А.¹, Буйлов Н.С.¹, Ситников А.В.²

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия

e-mail: polshin@phys.vsu.ru, тел.: 8 (920) 5638925

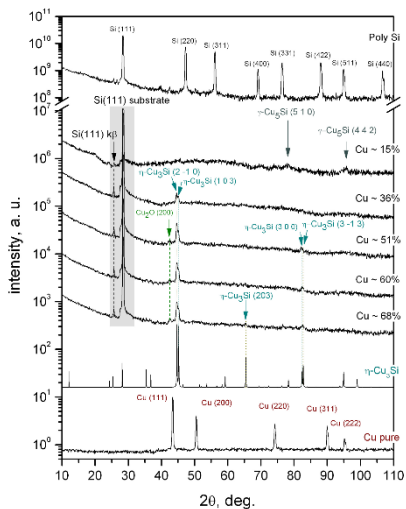
Нанокompозитные пленки Cu-Si имеют широкий спектр применения в микроэлектронике [1] и катализе [2]. Помимо этого, система Cu-Si представляет интерес в производстве анодов для литий-ионных аккумуляторов. Это связано с тем, что кремний перспективен для анодов, ввиду высокой емкости по сравнению с графитом [3]. А проблема увеличения объема анода (на 300%) решается использованием композитов Cu-Si и Si-Cu₃Si. Поэтому исследования влияния содержания меди на структуру и фазовый состав пленок Cu-Si важны и актуальны.

Пленки Cu-Si были получены методом ионно-лучевого распыления составной мишени на подложки из кремния Si (1 1 1) марки КДБ-12 в вакууме $1 \cdot 10^{-6}$ торр. Мишень представляет из себя медную (чистота Cu 99,99%) пластину (размер 100x240 мм) с кремниевыми навесками марки КДБ-12 (размер 100x10 мм). Постепенно увеличивающийся зазор между кремниевыми навесками обеспечивает градиентное изменение содержания Cu в пленке Cu-Si. Элементный анализ, который проводился методом энергодисперсионной спектроскопии, подтвердил, что содержание Cu растет вдоль всего образца, и изменяется от ~15 до ~65 вес. %. Фазовый состав пленок Cu-Si с различным содержанием Cu проводился методом рентгеновской дифракции на дифрактометре ДРОН 4-07. Анализ фазового состава также проводился методом ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС).

По результатам рентгенодифрактометрического анализа установлено, что самый интенсивный рефлекс на всех исследуемых образцах является отражением от подложки Si (111). Кроме того, других рефлексов от кремния в исследуемых образцах не наблюдается, отсюда можно сделать вывод, что кремний в пленке находится в аморфном состоянии (рисунок 1). В пленках с низким содержанием Cu (~15 вес.%) образуется два низкоинтенсивных рефлекса, которые, согласно международной кристаллографической базе, данных ICDD, связаны с фазой γ -Cu₅Si. С увеличением содержания Cu до ~36 вес.% фаза Cu₅Si пропадает, а в области углов 44–45° начинают проявляться рефлексы, связанные с фазой η -Cu₃Si (2-10) и (103). Рост содержания Cu до ~51 вес.% приводит к росту интенсивности этих рефлексов, а также появлению новых в области 2θ 82°, связанных с отражениями от плоскостей (300) и (3-13) фазы η -Cu₃Si. Помимо этого, на дифрактограмме в области 2θ 42° появляется рефлекс, который согласно базе данных ICDD относится к фазе Cu₂O, из чего можно сделать вывод, что Cu в пленке Cu-Si начинает окисляться. Дальнейшее увеличение содержания меди до ~60 и ~68 вес.% сопровождается ростом

интенсивности рефлексов, связанных с фазами η -Cu₃Si и Cu₂O, а также появлением еще одного рефлекса фазы η -Cu₃Si, связанного с отражением от плоскости (203).

Методом УМРЭС были подтверждены некоторые выводы, сделанные по



результатам рентгеновской дифракции. Так, в УМРЭС спектрах пленок Cu-Si с содержанием Cu от ~36 вес.% присутствует фаза Cu₃Si, а с ростом концентрации меди ее содержание увеличивается. Помимо этого, по результатам УМРЭС было выявлено, что высокое содержание Cu в пленке способствует окислению кремния.

Рисунок 1 – Рентгеновские дифрактограммы, зарегистрированные в области углов 2θ 43–47° для пленок с содержанием Cu ~36, 51, 60 и 65 вес.%, а также образца чистой меди Cu (1 1 1) и η -Cu₃Si.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10294, <https://rscf.ru/project/23-79-10294/>.

1. Liu Y. et al. Diffusion barrier performance of reactively sputtered Ta–W–N between Cu and Si //Microelectronic engineering. – 2004. – V. 75. – №. 3. – P. 309-315
2. Selamoglu N. et al. Copper-catalyzed etching of silicon by F2: Kinetics and feature morphology //Journal of applied physics. – 1988. – Т. 64. – №. 3. – С. 1494-1498.
3. Zhang Y., Zhu C., Ma Z. Si@ Cu₃Si nano-composite prepared by facile method as high-performance anode for lithium-ion batteries //Journal of Alloys and Compounds. – 2021. – Т. 851. – С. 156854.

МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТИ АНТИФЕРРОМАГНИТНОГО ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$

Понамарев Е.В.¹², Фролов А.С.¹, Усачёв Д.Ю.¹³, Столяров В.С.¹²

¹Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

²Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им.
Н.Л. Духова, Москва, Россия

³Санкт-Петербургский Государственный Университет, Санкт-Петербург, Россия

e-mail: Ponomarev.ev@phystech.su, тел.: 8 (915) 3862289

Топологические изоляторы представляют интерес за счет своей зонной структуры и состояний на их поверхности. Сильное спин-орбитальное взаимодействие приводит к инверсии зон проводимости и валентной зоны. За счет этого и наличия симметрии относительно обращения времени на поверхности реализуются металлические спин-поляризованные состояния, называемые конусом Дирака [1].

Магнитные примеси нарушают симметрию относительно обращения времени. Они снимают вырождение, и в спектре топологических состояний появляется магнитная щель [2]. Топологическое состояние локализовано вблизи первого слоя кристалла и на него влияет поверхностный эффективный магнитный момент. Величина магнитной щели зависит от компоненты намагниченности перпендикулярной поверхности топологического изолятора [3, 4]. Это создает интерес к исследованию магнитных свойств магнитных топологических изоляторов.

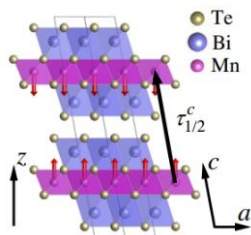


Рис. 1. Структура MnBi_2Te_4 .

Первым открытым собственным магнитным топологическим изолятором является MnBi_2Te_4 [5]. Это слоистый Ван-дер-Ваальсовый кристалл, состоящий из семи атомных слоев (Рис. 1). Магнитные моменты атомов марганца в нем упорядочены антиферромагнитно перпендикулярно плоскости слоев и чередуются от блока к блоку.

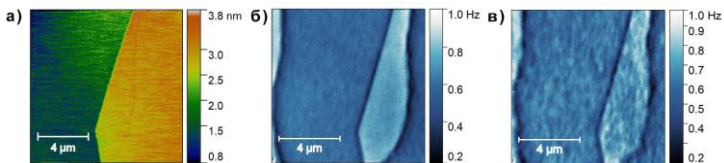


Рис. 2. а) Карта топографии образца, снятая в отсутствии внешнего поля. б-в: Карты магнитного сигнала. б — 1,90Тл, в — 1,95Тл.

Исследован антиферромагнитный топологический изолятор - состава $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$. Замена части атомов Mn на Ge приводит к разбавлению магнитной подрешётки [6]. Использован поверхностно-чувствительный метод криогенной магнитно-силовой микроскопии. Исследование проведено в полях от -6,100 Тл до 2,025 Тл. На рисунке 3.а приведена зависимость разности магнитного сигнала на двух доменах – доменный контраст от внешнего поля. Обнаружено, что поверхностный спин-флоп происходит при разных полях для двух видов доменов: при 1,4Тл для тех, у которых магнитные моменты верхнего слоя направлены антипараллельно приложенному полю (SSF_a), и при 1,9Тл для тех, у которых сонаправлен с ним (SSF_p). Выше 2,3Тл наблюдается объемный спин-флоп (BSF) эффект.

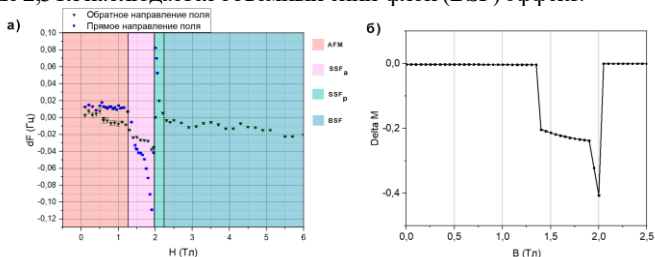


Рис. 3. а) Зависимость доменного контраста от приложенного поля. б) Результат моделирования доменного контраста.

При 1,95Тл в SSF_p фазе была обнаружено, что в пределах одного домена проявляется сильная пространственная магнитная неоднородность (рис. 2б). Были проведены дополнительные измерения в зависимости от температуры [5,7; 19,1] К, и разных расстояниях от магнитного зонда до образца [50; 150] нм. Полученная температура Нееля для $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$ составила 13К, что согласуется с ранее проведёнными исследованиями [6].

$$H = \sum_i^N (H_{CEF} - \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}_{ext}) - \frac{3k_b}{J(J+1)} \sum_{i,j}^N T_{ij} \vec{J}_i \cdot \langle \vec{J}_j \rangle - \frac{K}{J^2} \sum_i^N \vec{J}_{z,i} \cdot \langle \vec{J}_{z,i} \rangle$$

В рамках модели Гейзенберга было проведено моделирование объемных и поверхностных магнитных свойств $\text{Ge}_{0.4}\text{Mn}_{0.6}\text{Bi}_2\text{Te}_4$. Таким образом были воспроизведены поля объемного спин-флопа и насыщений вдоль разных кристаллографических осей, подобраны константы анизотропного обменного взаимодействия и показана возможность качественно воспроизвести поведение поверхностного SSF_a перехода (Рис. 3.б).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 22-72-10074.

1. Hasan M.Z., Kane C.L., *Rev. Mod. Phys.*, 2010, 82(4), 3045-3067.
2. Chen Y.L., Chu J.-H., *Science*, 2010, 329(5992), 659-662.
3. Hao Y.-J., *Phys. Rev. X*, 2019, 9(4), 041038.
4. Shikin A.M., Estyunin D.A., *Sci. Rep.*, 2020, 10, 13226.
5. Otrokov M.M., Klimovskikh I.I., *Nature*, 2019, 576(7787), 416-422.
6. Frolov A.S., Usachov D.Y., Tarasov A.V., *Commun. Phys.*, 2024, 7, 180.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ РЕДКОЗЕМЕЛЬНОГО ИНТЕРМЕТАЛЛИДА TbCo₂ МЕТОДОМ РЕЗОНАНСНОЙ ФОТОЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Пономарева Е.А.¹, Чумаков Р.Г.², Маслова С.А.¹, Гребенников В.И.^{1,3},
Герасимов Е.Г.^{1,4}, Мушников Н.В.^{1,4}, Кузнецова Т.В.^{1,4}

¹ ИФМ УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

² НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва, Россия

³ ФГБОУ ВО Уральский государственный университет путей сообщения,
г. Екатеринбург, Россия

⁴ Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург, Россия
e-mail: kat9107@yandex.ru, тел.: 8 (982) 7414667

Редкоземельные интерметаллиды RCo₂ (R – редкоземельный элемент) с кристаллической структурой типа MgCu₂ (фаза Лавеса C15, пространственная группа *Fd3m*) активно исследуются благодаря своим магнитным свойствам и особенностям электронной структуры. Уникальные характеристики позволяют рассматривать их в качестве перспективных функциональных материалов с гигантской магнитострикцией, большим магнитосопротивлением и магнитокалорическим эффектом [1-3]. Наличие магнитных редкоземельных ионов приводит к появлению магнитных моментов в подрешетке кобальта, при этом в зависимости от R меняются как магнитные свойства, так и электронная структура соединения.

Целью данной работы является исследование *d*- и *f*- состояний элементов, а также их влияние на формирование электронной структуры редкоземельного интерметаллида TbCo₂. Метод резонансной фотоэмиссионной спектроскопии с использованием синхротронного излучения в качестве источника фотонов позволяет выделить вклады редкоземельного и переходного металла в валентную зону, в частности исследовать локализацию *4f*-электронов тербия *3d*-электронов кобальта.

В результате анализа фотоэмиссионных спектров получена зависимость формы спектров валентной зоны TbCo₂ от энергии фотонов вблизи краев поглощения внутренних уровней тербия и кобальта. Исследованы процессы прямого и двухступенчатого формирования фотоэлектронов, упругого и неупругого каналов распада этих состояний с испусканием высокоэнергетических электронов за счет внутриатомного кулоновского взаимодействия.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект №23-72-00067).

1. Gratz E., Markosyan A.S., J. Phys. Cond. Matter., 2001, 13, 385-413.

2. Duc N.H., Kim Anh D.T., J. Magn. Magn. Mater., 2002, 873, 243-245.

3. Инишев А.А., Герасимов Е.Г., Мушников Н.В., Терентьев П.Б., Гавико В.С., ФММ, 2018, 11, 1113-1120.

РАСЧЕТ ОСЦИЛИРУЮЩЕЙ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ К-КРАЯ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ДЛЯ СТРУКТУР С РАЗНЫМ БЛИЖАЙШИМ ОКРУЖЕНИЕМ АТОМОВ ОДНОГО СОРТА

Потуданский Г.П., Курганский С.И.

*Воронежский государственный университет, г. Воронеж, Россия
e-mail: potudanskiy@phys.vsu.ru, тел.: +7 (473) 2208363*

В последние два десятилетия особое внимание привлекли полуметаллические магнитные материалы, так как эффективная генерация спин-поляризованного тока является серьезной проблемой. В сплавах Гейслера две спиновые подзоны на уровне Ферми могут приводить к 100% спин-поляризованной металлической проводимости. Одним из таких соединений является низший силицид железа Fe_3Si . Ранее мы уже проводили исследования сплавов Гейслера на основе атомов Co, Fe и Si [1]. В том числе для Fe_3Si мы моделировали электронную структуру, спектры USXES (ultrasoft X-ray emission spectroscopy – ультрамягкая рентгеновская эмиссионная спектроскопия) $L_{2,3} Si$ и XANES (X-ray absorption near edge structure – спектроскопия ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения) $K Si$ для ячейки с разным параметром [2].

В настоящей работе мы моделируем спектры XANES соединения Fe_3Si вблизи K -края рентгеновского поглощения железа. Расчеты проводились в рамках спин-поляризованной теории функционала плотности (DFT) в программном пакете WIEN2k [3], реализующем полнопотенциальный метод линеаризованных присоединённых плоских волн (FP-LAPW) при использовании обменно-корреляционного функционала в приближении обобщенной градиентной аппроксимации (GGA-PBE), который позволяет получить надежный результат при вычислении XANES спектров объемных кристаллов [4]. Методика вычисления XANES спектров описана в [4]. Для расчетов K -спектров XANES используем суперъячейку $2 \times 2 \times 2$ с остовой дыркой на уровне $1s$ атома железа.

Fe_3Si принадлежит к кубической сингонии, имеет пространственную группу симметрии 225_{Fm-3m} и элементарную ячейку с параметрами $a = b = c = 5.6540 \text{ \AA}$. Координаты атомов в элементарной ячейке приведены в таблице 1 [5].

Табл. 1. Координаты атомов Fe_3Si [5].

| Атом | X/a | Y/b | Z/c | Позиция Вайкоффа |
|------|-----|-----|-----|------------------|
| Fe | 1/4 | 1/4 | 1/4 | 8c |
| Fe | 1/2 | 1/2 | 1/2 | 4b |
| Si | 0 | 0 | 0 | 4a |

В этой структуре атомы Fe находятся в двух различных кристаллографических позициях с различным ближайшим окружением. Как известно, спектры XANES существенно зависят от ближайшего окружения, поэтому для корректного расчета спектра XANES в таких структурах должна быть учтена вариативность окружения.

Пусть в структуре имеются атомы сортов At (в нашем случае $At = (Fe, Si)$). Атомы сорта At могут находиться в нескольких неэквивалентных кристаллографических позициях, число которых равно n_A . Спектр поглощения атома

сорта At в i -ой позиции ($i = 1, 2, \dots, n_{At}$) обозначим через $I_i(At)$. Тогда суммарный спектр поглощения этих атомов в различных кристаллографических позициях будет равен

$$I(At) = \sum_{i=1}^{n_{At}} w_i I_i(At) \quad (1)$$

с весами w_i , определяемыми долей атомов сорта At , находящихся в i -ой позиции, в полном числе атомов сорта At в элементарной ячейке

$$w_i = \frac{k_{At,i}}{\sum_{j=1}^{n_{At}} k_{At,j}},$$

где $k_{At,i}$ – число атомов сорта At в i -ой кристаллографической позиции, а $\sum_{j=1}^{n_{At}} k_{At,j}$ представляет собой полное число атомов сорта At в элементарной ячейке.

В суперъячейке $2 \times 2 \times 2$ содержится 64 атома Fe с одним ближайшим окружением (на позиции Вайкоффа 8c) и 32 – с другим (на позиции Вайкоффа 4b). Были посчитаны XANES К-спектры для атомов железа в обеих кристаллографических позициях и взята их взвешенная сумма в соответствии с формулой (1).

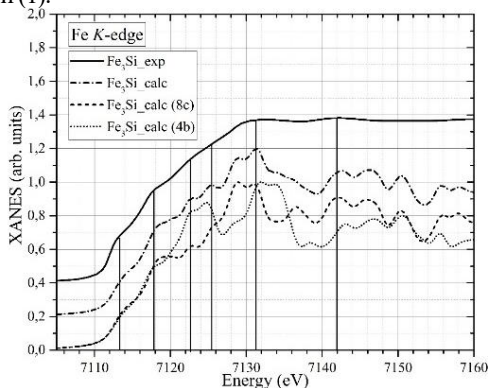


Рис. 1. Экспериментальный XANES К-спектр Fe_3Si_{exp} [6], модельный для объемной структуры Fe_3Si_{calc} и модельные для атомов Fe с разным ближайшим окружением на позициях Вайкоффа 8c и 4b.

На рисунке 1 приведены экспериментальный спектр Fe_3Si_{exp} [6] и три смоделированных спектра Fe_3Si_{calc} , Fe_3Si_{calc} (8c) и Fe_3Si_{calc} (4b). Отдельно спектры Fe_3Si_{calc} (8c) и Fe_3Si_{calc} (4b) хотя и согласуются частично с экспериментом, но имеют существенные различия, главным из которых является различие при энергии ~ 7131 эВ. Спектр Fe_3Si_{calc} , посчитанный по формуле (1), полностью соответствует экспериментальному. Локальные особенности при энергиях ~ 7113 эВ, ~ 7118 эВ, ~ 7122 эВ, ~ 7125 эВ, главный максимум при энергии ~ 7131 эВ и локальный максимум при энергии ~ 7142 эВ полностью соответствуют экспериментальным данным.

Таким образом мы показываем необходимость корректного учета наличия неэквивалентных кристаллографических позиций атомов одного и того же сорта в структуре и даем способ такого учета.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.

1. Peshkov Y.A., Yurakov Y.A., Barkov K.A., Terekhov V.A., Potudanskii G.P., Kurganskii S.I., Ivkov S.A., Semov Y.G., Bazlov A.I., Domashevskaya E.P., The European Physical Journal B, 2022, 95, 3, 40.

2. Потуданский Г. П., Пешков Я. А., Курганский С. И., Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики, 2022, 696-700.

3. Schwarz K., Blaha P., Madsen G.K.H., Comput. Phys. Commun., 2002, 147, 71–76.

4. Potudanskii G.P., Kurganskii S.I., Domashevskaya E.P., Materials Research Express, 2019, 6, 11, 1150g9.

5. Springer Materials. Электронный ресурс. Режим доступа: https://materials.springer.com/isp/crystallographic/docs/sd_1819643

6. Armay I., Serrano A., Braza V., Cid R., Sánchez A.M., López-Sánchez J., Castro G.R., Rubio-Zuazo J., Journal of Alloys and Compounds, 2023, 947, 169540.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ДОПОЛНИТЕЛЬНЫХ ЦЕНТРОВ СВЯЗЫВАНИЯ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА И ЦИНКА В МОЛЕКУЛЕ ГЕМОГЛОБИНА, ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СПЕКТРОВ XANES

Пронина Е. В., Кременная М. А., Лысенко В.Ю., Яловега Г.Э.

*Южный федеральный университет, город Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: ev_pronina_105@mail.ru, тел.: +79054270372*

Гемоглобин является многофункциональной белковой структурой, играет значимую роль в различных жизненно важных процессах в организме человека. Ионы железа, расположенные в простетической группе гемоглобина, отвечают за транспорт газов, а также выполняют буферную функцию. При условии неблагоприятных экзогенных и эндогенных факторов - окислительного и термического стресса, накопления токсических метаболитов, а также при некоторых патологиях, нарушающих гомеостаз крови может наблюдаться прогрессирующее аномальное накопление ионов переходных металлов на биоорганических макромолекулах. Известно, что нарушение структуры белка при формации комплексов с переходными металлами может приводить к формированию устойчивых, но нефункциональных структур со сниженной активностью [1], [2].

В работах [3, 4] было выдвинуто предположение о наиболее вероятной локализации координационного соединения молекулы гемоглобина с ионом цинка на основании анализа экспериментальных спектров рентгеновского поглощения для К-краев цинка, измеренных от белковых пленок, сформированных на поверхности жидкости. Измерения спектров XANES проводились в Курчатовском центре синхротронного излучения на линии поворотного магнита LANGMUIR в режиме выхода флуоресценции в условиях полного внешнего отражения.

В данной работе были построены структурные модели дополнительных центров связывания ионов железа и цинка в молекуле гемоглобина. Для полученных структур была проведена геометрическая оптимизация, рассчитаны спектры рентгеновского поглощения XANES за К-краем железа и цинка, проведен теоретический анализ экспериментальных спектров поглощения XANES.

В результате проведенных расчетов и сравнительного анализа экспериментальных и теоретических спектров были предложены возможные структуры локального окружения дополнительных центров связывания железа и цинка в молекуле гемоглобина.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №19-29-12052 mk).

1. Gomes, Cláudio M. (2019). Biophysical and Spectroscopic Methods for Monitoring Protein Misfolding and Amyloid Aggregation // [Methods in Molecular Biology, Protein Misfolding Diseases Volume 1873 (Methods and Protocols), 10.1007/978-1-4939-8820-4(Chapter 1), 3–18.

2. Giachini L. et al. Synergic approach to XAFS analysis for the identification of most probable binding motifs for mononuclear zinc sites in metalloproteins // Journal of Synchrotron Radiation. – 2010. – Т. 17. – №. 1. – С. 41-52.

3. Oleg V. Konovalov, Natalia N. Novikova, Mikhail V. Kovalchuk, Galina E. Yalovega, Alexey F. Topunov, Olga V. Kosmachevskaya, Eleonora A. Yurieva, Alexander V. Rogachev, Alexander L. Trigub, Maria A. Kremennaya, Valentin I. Borshchevskiy, Daniil D. Vakhrameev, Sergey N. Yakunin // *Materials*. 2020, V.13(20). P.4635
4. Н. Н. Новикова, С. Н. Якунин, М. В. Ковальчук, Э. А. Юрьева, Н. Д. Степина, А. В. Рогачев, М. А. Кременная, Г. Э. Яловега, О. В. Космачевская, А. Ф. Топунов // *Кристаллография*. 2019. Т.64, №6, с.931-937

СТРУКТУРА СПЕКТРА РФЭС ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ И ПРИРОДА ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ В MdO_2

Тетерин Ю.А.^{1,2}, Рьжков М.В.³, Путков А.Е.², Маслаков К.И.^{1,2}, Тетерин А.Ю.², Иванов К.Е.², Калмыков С.Н.¹, Петров В.Г.¹

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

²НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

³Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: Teterin_YA@nrcki.ru, тел.: 8 (499) 1969252

Полностью релятивистским методом дискретного варьирования (РДВ) рассчитано электронное строение MdO_2 , определены теоретические интенсивности спектра РФЭС (рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии) валентных электронов MdO_2 в диапазоне энергий связи от 0 до ~40 эВ (рис. 1) и построена схема молекулярных орбиталей (МО), которая необходима для расшифровки рентгеновских спектров (фотоэлектронных, конверсионных, эмиссионных, поглощения и т.д.).

На гистограмме спектра РФЭС валентных электронов MdO_2 (рис. 1) наблюдается сложная структура. В нее вносят вклад электроны внешних валентных (ВМО, от 0 до ~15 эВ) и внутренних валентных (ВВМО, от ~15 до ~40 эВ) молекулярных орбиталей (МО). Интенсивность линий ВМО в большой степени связана с Md 5f- и 6d-электронами, а ВВМО – с Md 6p_{3/2}- и O 2s-электронами.

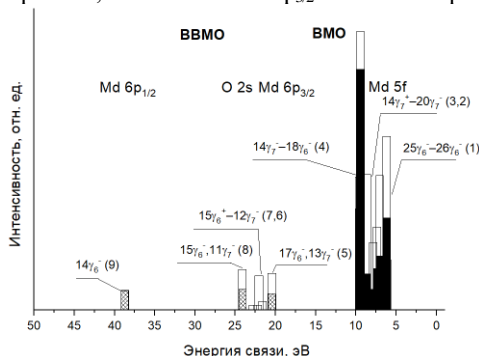


Рис. 1. Гистограмма рассчитанного (РДВ) спектра РФЭС валентных электронов MdO_2 : черным отмечен вклад Md 5f-электронов, штрихами отмечен вклад Md 6p-электронов в интенсивность линий.

На основе состава МО рассчитан эффективный заряд Md для электронной конфигурации (РДВ) Md 6s²6p^{5.98}5f^{2.44}6d^{1.30}7s^{0.24}7p^{0.54} в MdO_2 . Величина этого заряда равна +0.50 электрона, что меньше значения +4, принимаемого в ионном приближении. Такая величина эффективного заряда свидетельствует о высоком

вкладе ковалентной составляющей в химическую связь и согласуется с данными, полученными для диоксидов более легких актиноидов [1,2].

Из анализа расчета заселенностей перекрывания АО Md и O по Малликену найдено, что электроны ВВМО на ~34 % ослабляют химическую связь в MdO_2 , обусловленную электронами ВМО.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИИЦ «Курчатовский институт» и государственного задания Института химии твердого тела УрО РАН (тема №_124020600024-5).

1. Teterin A.Yu., Ryzhkov M.V., Teterin Y.A., Vukcevic L., Terekhov V.A., Maslakov K.I., Ivanov K.E., Nuclear Technology and Radiation Protection, 2008, 23(2), 34 – 42.

2. Teterin Yu.A., Putkov A.E., Ryzhkov M.V., Maslakov K.I., Teterin A.Yu., Ivanov K.E., Kalmykov St.N., Petrov V.G., Mendeleev Communications, 2023, 33(5), 605 – 607.

БАЙЕСОВСКАЯ РЕКОНСТРУКЦИЯ ВАЛЕНТНЫХ ПАРЦИАЛЬНЫХ ПЛОТНОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ ПО ДАННЫМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ (XPS)

Радзивончик Д.И.¹, Гребенников В.И.¹, Беляев Д.В.¹, Кох К.А.², Чумаков Р.Г.³,
Кузнецова Т.В.^{1,4}

¹*Институт физики металлов имени М. Н. Михеева УрО РАН,
Екатеринбург, Россия*

²*ИГМ СО РАН, Новосибирск, Россия*

³*НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

⁴*Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия
e-mail: radzivonchik@imp.uran.ru, тел.: (343) 3783865*

Знание о парциальных плотностях электронных состояний (PDOS) материалов играет важную роль в понимании их физических свойств. Чтобы составить представление о парциальных вкладах в валентной зоне какого-либо материала, используют источник синхротронного излучения, который позволяет плавно изменять энергию падающих на исследуемый образец рентгеновских фотонов и, таким образом, «подсвечивать» парциальные вклады в фотоэлектронном спектре (XPS) от различных орбитальных состояний атомов. Однако часто получаемый набор спектров позволяет сделать лишь примерную оценку об энергетическом распределении валентных состояний. В данной работе мы предлагаем метод на основе статистического байесовского вывода, который позволяет реконструировать PDOS валентной зоны, используя серию XPS спектров, полученных при различных энергиях рентгеновских фотонов.

Спектр XPS равен сумме произведений PDOS и сечений фотоионизации для соответствующих электронных состояний атомов при данной энергии фотонов (с учетом перенормировки членов для исключения влияния потока фотонов). В случае рассмотрения нескольких спектров XPS их связь с PDOS описывается системой уравнений. Обратная задача, в которой необходимо найти PDOS, зная спектр XPS и сечения фотоионизации, является некорректной и может иметь несколько решений. Такую обратную задачу можно решить с помощью статистического байесовского вывода. Если PDOS параметризовать, то с помощью метода статистического байесовского вывода с использованием алгоритма реплично-обменного Монте-Карло для семплирования можно получить апостериорное распределение параметров. Полученное вероятностное распределение является, как правило, единственным и устойчивым по отношению к входным данным, что, следовательно, позволяет определить единственное и устойчивое решение, если оценивать параметры, например, по максимуму или среднему значению распределения. Таким образом в некоторых случаях можно реконструировать PDOS даже при наличии достаточно зашумленного спектра. Отметим, что для успешной реконструкции желательно, чтобы число уравнений в системе соответствовало или было больше числа неизвестных переменных, т.е. чтобы число спектров XPS, полученных при разных энергиях фотонов, соответствовало или было больше числа неизвестных

PDOS. Также необходимо, чтобы величины сечения фотоионизации орбитальных вкладов атомов в соединении достаточно хорошо отличались между собой в используемом диапазоне энергий фотонов.

Предлагаемый метод применен для различных классов халькогенидов: GaSe и CuGaSe₂, $\text{V}_{1.8}\text{Mn}_{0.1}\text{In}_{0.1}\text{Se}_3$ и $\text{V}_{1.8}\text{Co}_{0.1}\text{In}_{0.1}\text{Se}_3$. В докладе для перечисленных соединений будет представлено сравнение доминирующих PDOS валентной зоны, полученных путем байесовской реконструкции на основе массива спектров XPS для энергий фотонов в пределах 50 – 700 эВ, с аналогичными PDOS, полученными с помощью теории функционала плотности. Метод потенциально может быть обобщен на случай спин-поляризованных PDOS, что позволит извлекать магнитный момент атомов по данным спин-поляризованного XPS.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 23-72-00067.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МОНООКСИДА МЕДИ

Радина В.Р.

ФГБОУ ВО «ВГУ», г. Воронеж, Россия
e-mail: viminova@inbox.ru, тел.: 8 (900) 9441347

Особое место среди оксидов переходных металлов занимает монооксид меди CuO, обладающий полезными физическими, физико-химическими и медико-биологическими свойствами.

В данной работе представлены результаты теоретического исследования XANES (X-ray absorption near edge structure) L_3 -спектров меди и K -спектров кислорода соединения CuO в сравнении с экспериментальными данными [1,2]. Монооксид меди имеет моноклинную сингонию кристаллической решётки и относится к пространственной группе $C 2/c$

Расчет электронной структуры исследуемого соединения проводился в рамках теории функционала плотности полнопотенциальным методом линейаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ) в программном пакете Wien2k [3] с использованием обобщенного градиентного приближения (GGA) для обменно-корреляционной энергии и приближения остовой дырки [4]. В данной работе XANES спектры оксида меди CuO для сравнения были рассчитаны в трех вариантах:

Элементарная ячейка, атом содержит половину остовой дырки

Суперъячейка, атом содержит половину остовой дырки

Суперъячейка, атом содержит остовную дырку

Для монооксида меди XANES Cu L_3 -спектр имеет один ярко выраженный максимум при энергии 931 эВ. Этот максимум проявился во всех вариантах расчета. Но в спектре, который был рассчитан для атома меди с целой остовой дыркой в суперъячейке, при энергии 937 эВ также наблюдается значительный рост интенсивности, отсутствующий в экспериментальном спектре. В целом этот спектр хуже согласуется с экспериментальным, чем спектры с половиной дырки на основном $2p$ -уровне, независимо от того, использовалась ли в расчете элементарная ячейка или суперъячейка. В спектрах, которые были рассчитаны в элементарной ячейке и в суперъячейке с половиной остовой дырки, этот пик незначителен, и спектры в целом значительно лучше согласуются с экспериментом [1].

XANES O K -спектр оксида меди CuO характеризуется тремя максимумами при энергиях 528 эВ, 533,5 эВ и 537 эВ. В спектрах, которые были рассчитаны в элементарной ячейке и суперъячейке для атома кислорода с половиной остовой дыркой на $1s$ -уровне, первый пик получился самым интенсивным. В случае моделирования XANES O K -спектра в суперъячейке с остовой дыркой, как и в экспериментальном спектре [2], наибольшую интенсивность имеет второй максимум при энергии 533.5 эВ. Этот теоретический спектр и по положению, и по ширине пиков, а также по соотношению их интенсивностей наилучшим образом согласуется с экспериментом [2].

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках соглашения № 075-15-2021-1351.

1. Grioni M., van Acker J.F., Czyzyk M.T., Fuggle J.C., Phys. Rev. B: Condens. Matter., 1992, 45, 3309-3312.
2. Wang Y., Lany S., Ghanbaja J., Fagot-Revurat Y., Chen Y.P., Soldera F., Horwat D., Mücklich F., Pierson J.F., Phys. Rev. B, 2016, 94, 245418.
3. Schwarz K., Blaha P., Madsen G.K.H., Comput. Phys. Commun., 2002, 147, 71.
4. Manyakin M. D., Kurganskii S. I., Dubrovskii O. I., Chuvenkova O. A., Domashevskaya E. P., Ryabtsev S. V., Ovsyannikov R., Parinova E. V., Sivakov V., Turishchev S. Yu., Materials Science in Semiconductor Processing, 2019, 99, 28-33.

РАЗГАДЫВАНИЕ МЕХАНИЗМА ПОЯВЛЕНИЯ АКТИВНОГО ФОТОПРОТЕИНА: ТЕОРЕТИКО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Рогова А.В.^{1,2}, Щугорева И. А.², Маликова Н. П.³, Высоцкий Е. С.³, Томилини Ф.Н.^{1,2,4}

¹*Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия*

²*Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр СО РАН», Красноярск, Россия*

³*Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия*

⁴*Институт физики им. Куренского ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия*

e-mail: arogoval927@gmail.com, тел.: 8 (903) 9498004

Способность к биолюминесценции большинства морских организмов обусловлена наличием в клетках светоизлучающего субстрата и/или специфического фермента. Окисление субстратов в биолюминесцентных белках приводит к образованию продукта реакции в возбужденном состоянии, который при релаксации в основное состояние излучает квант света. Биолюминесцентные системы условно можно разделить на две группы — люциферазы и Ca^{2+} -регулируемые фотопротеины. Из всех известных фотопротеинов в качестве репортеров в аналитике используются наиболее изученные – акворин из *Aequorea victoria* и обелин из *Obelia longissima* [1]. Более того, развивающейся темой является создание биолюминесцентного биосенсора на основе ДНК- и/или РНК-олигонуклеотидов (аптамеров), позволяющих связываться с молекулярными мишенями различной природы, от маленьких молекул до белков и клеток. Таким образом, биосенсоры, основанные на комбинации аптамеров и фотопротеинов, являются решением в точности диагностики и эффективности адресной терапии. Важной составляющей исследования является понимание механизмов связывания белков и аптамеров (структурные данные комплексов и отдельных молекул). Взаимодействие олигонуклеотидов с мишенью, приводит к конформационным изменениям белка и таким образом, к изменению реакционной способности субстрата.

С помощью данных о кристаллической структуре фотопротеинов и комплексных исследованиях их биохимических свойств были сделаны предположения о «протонно-релейном» механизме запуска реакции окисления целентеразина (CTZ), в том числе, роль отдельных аминокислотных остатков субстрат-связывающей полости в процессе реакции [2,3]. Однако, первый шаг реакции – образование активного фотопротеинового комплекса, не до конца ясен. Кроме того, pH среды может влиять на ионизацию субстрата и таким образом, на образование активного фотопротеина. Это стимулирует к дальнейшим фундаментальным исследованиям механизма реакции и спектральных свойств CTZ в водных растворах/фотопротеиновых комплексах как экспериментальными, так и теоретическими методами.

Используя программу GAMESS [4], геометрия различных ионных форм субстрата была оптимизирована с учётом растворителя в SMD модели с помощью

DFT-функционалов. Получены спектры поглощения различных таутомерных форм СТЗ (TD/ CAM-B3LYP/*aug-cc-PVDZ*), в том числе, рассчитан максимум спектра поглощения субстрата в активном центре обелина (FMO1-TD/CAM-B3LYP/6-31G(d)). Проведено соотнесение ионной формы целентеразина и pH раствора. С помощью метода эластичной ленты с подталкиванием (NEB) [5] в ω B97x-D функционале и 6-31G(d,p) базисе получена реакция образования 2-гидропероксицелентеразина (2HP-СТЗ) и путь её протекания.

Расчётная часть работы выполнена в рамках научной тематики Госзадания КНЦ СО РАН.

1. Vysotski E.S., Markova S.V., Frank L.A., Molecular Biology, 2006, 40, 355-367.
2. Liu Z.J.; Stepanyuk G.A.; Vysotski E.S. et al. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2006, 103, 2570-2575.
3. Natashin P.V., Burakova, L.P., Kovaleva M.I., et al. International Journal of Molecular Sciences, 2023, 24, 6869.
4. Barca G. M. J., Bertoni C., Carrington, L., et al. The Journal of Chemical Physics, 2020, 152, 154102.
5. Zhao L., Watanabe K. J., Nakatani N., et al. The Journal of Chemical Physics, 2020, 13, 153.

ВЛИЯНИЕ УСИЛЕНИЯ ЛОКАЛЬНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ АГРЕГАТОВ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА НА СПЕКТРЫ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИОНОВ В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТРИЦАХ

Д. С. Рубаник^{1*}, В. В. Срабионян¹, В. А. Дурыманов¹, И. А. Викленко¹, Л. А. Авакян¹, М. П. Ветчинников², Г. Ю. Шахгильдян², В. Н. Сигаев², Л. А. Бугаев¹

¹*Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, РФ*

²*Российский химико-технологический университет имени Д. И.*

Менделеева, Москва, РФ

e-mail: rubanik@srfedu.ru, тел.: 8 (928) 1372542

Известно, что наночастицы (НЧ) серебра, допированные в диэлектрические матрицы, содержащие редкоземельные ионы (РЗИ), проявляют особые оптические свойства [1]. Это происходит из-за выраженного явления локализованного плазмонного поверхностного резонанса (ЛППР), проявляющегося в локализации энергии падающего излучения в нанометровом и фемтосекундных масштабах [2]. Использование таких диэлектрических матриц в качестве эффективных сенсibilizаторов для усиления лазерных переходов в РЗИ является перспективным направлением в этой области. Изучение механизмов влияния НЧ серебра на характеристики люминесценции РЗИ в оксидных стёклах указывает на преобладание эффекта усиления локального электрического поля при условии расположения таких НЧ вблизи РЗИ [3].

В данной работе представлен подход, позволяющий на основе данных ПЭМ рассчитывать среднее усиление интенсивности локального электрического поля (ЛЭП) в окрестности агрегатов НЧ серебра и его влияние на спектры люминесценции РЗИ. Анализ рассчитанных пространственных распределений ЛЭП позволяет получить как одномерные зависимости среднего усиления ЛЭП от расстояния до поверхности ближайшей частицы в агрегате, так и количественно охарактеризовать его для каждой из возможных структурных конфигураций локальной системы “Плазмонные НЧ - РЗИ” с использованием среднего усиления интенсивности ЛЭП в окрестности агрегата [4]. Расчеты усиления интенсивности ЛЭП от длины волны возбуждения показали, что при использовании длин волн возбуждения, близких к резонансным длинам волн агрегатов НЧ, усиление интенсивности ЛЭП многократно увеличивается. Предлагается способ оценки усиления люминесценции на основе расчетов увеличения интенсивности ЛЭП. Выявлено, что отсутствие нанокластеров серебра (~1-2 нм) в диэлектрических матрицах, допированных РЗИ, с хорошей точностью позволяет оценить усиление интенсивности люминесценции на основе смоделированного усиления интенсивности ЛЭП.

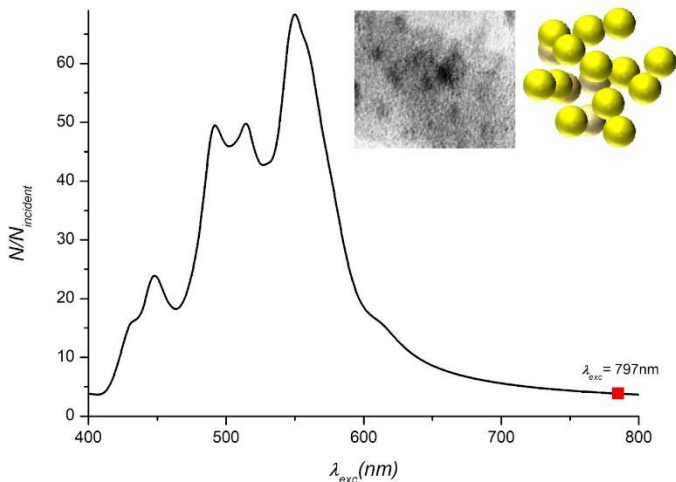


Рисунок 2 Получение распределения усиления интенсивности ЛЭП по данным ПЭМ [5]

Полученные данные позволяют формировать рекомендации по экспериментальному созданию наиболее эффективных лазерных сред, а также предсказать оптические свойства таких систем.

Работа выполнена при поддержке российского научного фонда (проект 23-12-00102).

1. Stockman M.I. Nanoplasmonics: past, present, and glimpse into future // Opt. Express. 2011. Т. 19, № 22. С. 22029.
2. Barnes W.L., Dereux A., Ebbesen T.W. Surface plasmon subwavelength optics // Nature. 2003. Т. 424, № 6950. С. 824–830.
3. Zhang W. и др. Radiative transition, local field enhancement and energy transfer microcosmic mechanism of tellurite glasses containing Er³⁺, Yb³⁺ ions and Ag nanoparticles // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2015. Т. 159. С. 39–52.
4. Fares H. и др. Surface plasmon resonance induced Er³⁺ photoluminescence enhancement in tellurite glass // J. Appl. Phys. 2015. Т. 117, № 19.
5. Amjad R. J. [и др.]. Enhanced infrared to visible upconversion emission in Er³⁺ doped phosphate glass: Role of silver nanoparticles // Journal of Luminescence. 2012. № 10 (132).

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ОПТИЧЕСКИХ ПОСТОЯННЫХ В ОБЛАСТИ $1s$ ПОРОГА ИОНИЗАЦИИ $3d$ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ МЕТОДОМ КРАМЕРСА КРОНИГА

Рутковский В.О., Бакина К.А., Петрова О.В., Сивков Д.В., Скандаков Р.Н. ,
Некипелов С.В., Сивков В.Н.

ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, Россия
e-mail: valeriy.rutkovskiy@mail.ru, тел.: 8 (912) 1710314

Определение спектральных зависимостей (S_3) оптических констант (коэффициентов поглощения, преломления и отражения, атомного форм-фактора) для широкого спектра материалов и химических соединений и по сей день остается актуальной задачей для современного материаловедения, в силу отсутствия точных актуальных данных по многим материалам. Измерить эти S_3 напрямую в рентгеновской области спектра не представляется возможным из-за больших погрешностей и физических ограничений, а теоретические модели не позволяют осуществить точный расчет данных зависимостей. Именно поэтому метод измерения коэффициентов для широкого диапазона излучений основанный на применении соотношений Крамерса-Кронига (KKR) [1,2] актуален для решения данной задачи. Интегральные соотношения KKR связывают коэффициенты поглощения и преломления (мнимую и вещественную части комплексного коэффициента преломления) и позволяют определить S_3 показателя преломления через измеренные в широком спектральном интервале сечения поглощения. Соотношения KKR также связывают действительную и мнимую части комплексных значений диэлектрической постоянной, коэффициентов отражения и преломления и атомный форм-фактор, поэтому из данных по сечениям поглощения можно определить все оптические постоянные в области резонансного поведения.

В настоящей работе показано на примере никеля, что этот метод может быть применен для $3d$ переходных металлов. Никель является достаточно хорошо изученным металлом, для которого имеется много спектральных данных по сечениям поглощения что позволяет с определить искомые константы.

Для расчетов были использованы данные по S_3 сечений поглощения в интервале 2-100 КэВ взятые из таблиц Хенке [3] и Saloman [4], интерполированные по степенному закону вне $Ni1s$ – края поглощения. В инфракрасной, оптической, ультрафиолетовой и ультрамягкой рентгеновской областях спектра использовались данные по коэффициентам поглощения из работ [5,6]. Сумма сечений поглощения никеля в интервале энергий 0-100 кэВ составила 27,9, что хорошо согласуется с правилом сумм (Томаса-Рейхе-Куна) и близко к числу электронов в атоме никеля $Z = 28$, что указывает на высокую достоверность и точность данных по сечениям поглощения в широкой области спектра металлического никеля. Результаты были получены средствами языка программирования Python с использованием библиотеки Scipy.

Работа выполнена при поддержке «Министерства науки и высшего образования России» в рамках соглашения N 075-15-2021-1351.

1. R. d. L. Kronig, J. Opt. Soc. Am. 1926. V.12(6). pp. 547 – 557.;
2. H. A. Kramers, Atti. Congr. Intern. Fisici. Como. 1927. V.2. p. 545.;
3. B. L. Henke, E. M. Gullikson, and J. C. Davis, At. Data Nucl. Data Tables. 1993. V.54. pp. 181 – 343.;
4. E. B. Saloman, J. H. Hubbell, J. H. Scofield, X-Ray attenuation cross section for energies 100eV to 100keV and elements $Z=1$ to $Z=92$. Data Nucl. Data Tables. 38, 1-197 (1988).
5. L.A. Feldkamp, M.B. Stearns, S.S. Shinozaki, Phys. Rev.B, 20, 1310, (1979)
6. V.N. Sivkov, S.B. Nekipelov, D.V. Sivkov, et.al. Bulletin RAS:Physics, 71, 76, (2007).

СРАВНИТЕЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ КОНТАКТНЫХ СЛОЕВ GaN, n-GaN и p⁺-GaN, СИНТЕЗИРОВАННЫХ МЕТОДОМ РА МВЕ НА ВИРТУАЛЬНЫХ ПОДЛОЖКАХ GaN/c-Al₂O₃

П. В. Середин¹, Д. Л. Голощапов¹, Д. Е. Костомаха¹, Я. А. Пешков¹, Н. С. Буйлов¹, А. А. Гайворонская¹, А. М. Мизеров², С. Н. Тимошнев², М. С. Соболев², Е. В. Убийвовк³, В. И. Земляков⁴, П. Л. Пармон⁵, П. П. Куцько⁵

¹Воронежский государственный университет, Воронеж, РФ

²Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет имени Ж. И. Алфёрова Российской академии наук, Санкт-Петербург, РФ

³Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, РФ

⁴Московский институт электронной техники, Зеленоград, Москва, РФ

⁵Научно-исследовательский институт электронной техники, Воронеж, РФ

e-mail: paul@phys.vsu.ru, тел.: 8 (473) 2208363

В работе показано, что с использованием технологии молекулярно-пучковой эпитаксии с плазменной активацией азота (МПЭ ПА) могут быть сформированы структурно-качественные эпитаксиально-дорастиваемые контактные GaN, n-GaN и p⁺-GaN на виртуальных подложках GaN/c-Al₂O₃ в Ga-обогащенных условиях при относительно низких температурах роста ~700°C. Показано, что на начальной стадии роста контактных слоев происходит эффективная фильтрация дислокаций, прорастающих из буферного GaN слоя виртуальной подложки, сформированного методом MOCVD.

Выполненные на основе данных Рамановской микроспектроскопии расчёты величины остаточных напряжений указывают на высокое структурной качество GaN, n-GaN и p⁺-GaN контактных слоев независимо от уровня легирования кремнием.

Определенное с помощью метода передающей линии контактное сопротивление, приведенное к ширине площадки, для структуры с контактным слоем p⁺-GaN составило ~0.11 Ом*мм, а для n-GaN ~0.5 Ом*мм.

Исследования выполнены при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования РФ (грант № FZGU-2023-0006). Синтез контактных слоев GaN, n-GaN и p⁺-GaN проводился в рамках исполнения гранта Министерства науки и высшего образования РФ № FSRM-2023-0006.

ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ НАБОРА КОМПЛЕМЕНТАРНЫХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ.

Скандаков Р.Н.

Физико-математический институт, ФИЦ Коми НЦ УрО РАН,

Сыктывкар, Россия

e-mail: scanick@uandex.ru, тел.: 8 (908) 3296082

Изучение атомной и электронной структуры наноструктурированных систем является одной из ключевых задач современного материаловедения. Сложное атомное строение и наноразмерная структура таких материалов требуют использования комплекса взаимодополняющих методов исследования. Эти методы должны обеспечивать высокую информативность для объектов на наноуровне, быть неразрушающими и демонстрировать высокую чувствительность к атомному строению образца и его изменениям под воздействием физических и химических факторов. Традиционными, позволяющими непосредственно получать детальную информацию о веществе на наноуровне, являются методы спектроскопии рентгеновского поглощения (Near Edge X-ray Absorption Fine Structure Spectroscopy, NEXAFS) [1] и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (X-ray Photoelectron Spectroscopy, XPS) [2], которые в сочетании с такими известными методами, как электронная микроскопия, рамановская спектроскопия и рентгеновская дифрактометрия, предоставляют возможность получить большую всеобъемлющую информацию об атомной и электронной структуре материалов.

Многостенные углеродные нанотрубки (multi wide carbon nanotube, MWCNT) характеризуются механической прочностью, хорошей электрической проводимостью, стойкостью в агрессивных средах, термической стабильностью и большой площадью внешней поверхности, что делает MWCNT перспективным материалом для применения в различных областях науки и техники. Они применяются как в виде модифицирующих добавок для создания различных гибридных и композиционных наноматериалов, так и основой нанокомпозитов путем осаждения на внешнюю поверхность различных соединений в виде наноразмерных покрытий и частиц [3]. Однако создание подобных материалов связано с рядом проблем. Углерод – материал химически инертный и имеет низкое сродство к матрице, что ухудшает свойства получаемых композиционных материалов. Для решения этой проблемы необходимо модифицировать поверхность углеродных нанотрубок путем нанесения на их внешнюю поверхность металлосодержащих частиц, что позволяет создавать новые гибридные нанокомпозитные материалы с уникальными физическими свойствами. Подобные материалы могут найти свое применение в качестве наноструктурированных гетерогенных катализаторов различных химических процессов, сенсорных устройств, химических источников тока и элементов различных электронных устройств.

В работе проведены NEXAFS исследования нанокомпозитов металлов C₆/MWCNT, Fe/MWCNT, Cu/MWCNT, WC/MWCNT, приготовленных путем

декорирования внешней поверхности многостенных углеродных нанотрубок (Multi Walled Carbon Nanotube, MWCNT) наноразмерными слоями хрома и железа [4], наночастицами карбида вольфрама [5] и меди [6], методом пиролиза хроморганической жидкости $[\text{Cr}(\text{C}_6\text{H}_6)_2]$, пентакарбонила железа $[\text{Fe}(\text{CO})_5]$, гексакарбонила вольфрама $\text{W}(\text{CO})_6$ и формиата меди $\text{Cu}(\text{HCOO})_2$, соответственно. Показано, что в инертной атмосфере аргона наноразмерные слои и наночастицы 3d-металлов и карбида вольфрама осаждаются на поверхности MWCNT в виде сплошных слоев (Cr, Fe) или частиц разного размера, (WC, Cu) состоящих из ядра металлической меди и оболочки из закиси меди. Однако, после выноса на атмосферу, на поверхности осажденных слоев наблюдается образование оксидов металлов. Определено, что хорошая адгезия осажденных хрома, железа и вольфрама к внешней поверхности MWCNT обеспечивается образованием химической связи между атомами углерода внешнего графенового слоя нанотрубки и атомами кислорода оксидов металлов, а также образованием связей углерод — металл.

В работе получены данные по процессу модификации фуллерита C_{60} при НИР обработке в атмосфере аргона, в диапазоне температур 900-1200 К и давлении 1000 атм. Показано, что в результате НИР обработки происходит слияние молекул фуллерена и образование замкнутых наноразмерных структур, состоящих в основном из гексагонов [7].

Проведены исследования нанопористого кремния, приготовленного травлением в стандартном растворе без и с добавлением 5% йода [8]. Определены основные структурные параметры слоев (толщина, деформация и пористость), а так же показано, что поверхность кремниевого скелетона покрывается слоем оксида кремния толщиной 1.5-2.4 нм, при этом йод, присутствующий в электролите, не внедряется в структуру кремния, обеспечивая тем самым увеличение его пористости. Показано, что NEXAFS Si2p-спектры кремниевого скелетона совпадают со структурой спектра кристаллического кремния, а NEXAFS 2p-спектр поверхностного слоя кремния соответствует NEXAFS 2p-спектру хорошо координированного SiO_2 . Обнаружено, что интерфейс между кремниевым скелетоном и покрывающим слоем оксида кремния состоит из слоев кремния $\text{Si}^+(0,1 \text{ нм})$, $\text{Si}^{+2}(0,05 \text{ нм})$, $\text{Si}^{+3}(0,25 \text{ нм})$.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351.

1. Stöhr J. NEXAFS Spectroscopy / J. Stöhr. - Berlin: Springer, 1992. - 403p.
2. Электронная спектроскопия / К. Зигбан и др. - М.: Мир, 1971.
3. Eder D. Carbon nanotube– inorganic hybrids / D. Eder // Chemical Reviews. 2010. № 110. P. 1348-1385.
4. D. Sivkov, O. Petrova, A. Mingaleva, A. Ob'edkov, B. Kaverin, S. Gusev, I. Vilkov, S. Isaenko, D. Bogachuk, R. Skandakov, V. Sivkov, S. Nekipelov., Nanomaterials, 2020, V.10. 374.
5. Сивков Д.В., Некипелов С.В., Петрова О.В., Виноградов А.С., Мингалева А.Е., Исаенко С.И., Макаров П.А., Обьедков А.М., Каверин Б.С., Вилков И.В., Гусев С.А., Аборкин А.В., Скандаков Р.Н., Сивков В.Н. Материалы XXV Международного симпозиума «Нанозлектроника и нанозлектроника», 2021, Т. 1. С. 452-453.

6. Sivkov D.V., Petrova O.V., Nekipelov S.V., Vinogradov A. S., Skandakov R. N., Isaenko S. I., Ob'edkov A. M., Kaverin B. S., Vilkov I. V., Korolev R. I., Sivkov V. N. , *Nanomaterials*, 2021, 11(11), 2993.

7. Sivkov D.V., Petrova O.V., Nekipelov S.V., Skandakov R. N., Bakina K. A., Isaenko S. I., Ob'edkov A. M., Kaverin B. S., Sivkov V. N. , *Appl. Sci.* 2021, 11(24), 11646.

8. Скандаков Р.Н., Некипелов С.В., Петрова О.В., Сивков В.Н., Бакина К.А., Сборник тезисов III Всероссийской молодежной конференции ВДФМ, 2023, 149-150.

ИК ФОТОДЕТЕКТОРЫ НА КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ: ДОСТИЖЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Смирнов М.С., Овчинников О.В.

*ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, Россия
e-mail: Smirnov_M_S@mail.ru, тел.: 8 (473) 2208780*

Развитие синтетических технологий для коллоидных полупроводниковых нанокристаллов или квантовых точек (КТ), способствует активному расширению области их практических приложений. Интерес среди многообразия простых и бинарных (тройных) полупроводников в массивном состоянии к коллоидным КТ определяется размерно-зависимыми оптическими и электрофизическими свойствами, что определяет перспективы их применений в качестве новых материалов и устройств фотовольтаики, фотокатализа, люминесцентного маркирования и визуализации различных процессов и объектов, включая живые ткани. Особое место среди приложений занимают различные квантовые сенсоры, в том числе фотодетекторы, люминесцентные химически активные составы, фотовольтаические ячейки для солнечной энергетики, системы зондирования атмосферы, системы связи и т.д. Для большинства из них наилучшим образом подходят КТ из соединений узкозонных полупроводников, поглощающих и/или излучающих в ИК диапазоне спектра. Так, для создания эффективных ИК чувствительных квантовых детекторов наиболее перспективными материалами в литературе признаны коллоидные нанокристаллы халькогенидов ртути, свинца и серебра. Нанесение коллоидных КТ на проводящие подложки позволяет за счет фотопроводимости пленок, сформированных в рамках техники послойного осаждения, достигать эффективной генерации и разделения электрон-дырочных пар. Такой подход не требует использования охлаждения как, например, для InSb- и HgCdTe- пленочных фотоприемников, и достаточно дешев, и прост, по сравнению субмонослойными покрытиями квантовыми точками, синтезируемыми методом молекулярно-лучевой эпитаксии на монокристаллических.

Имеющиеся на сегодняшний день достижения в области установления фундаментальных закономерностей фотопроцессов, определяющих эффективность разделения носителей заряда в ИК фоточувствительных многослойных структурах сосредоточены преимущественно на обсуждении отдельных вопросов, посвящённых в значительной степени методикам синтеза простых квантовых точек, приёмам замены лиганда, с целью управления параметрами фотопроводимости плёнок из квантовых точек и т.д. Имеется ряд наблюдений, указывающий на то, что состояние интерфейсов КТ имеет первостепенное значение для фотопроводимости и во многом определяется типом органического или неорганического лиганда. В отдельных работах продемонстрировано, что использование ионов галогенов (хлор, йод) или органических лигандов их содержащих, значительно повышает фототок в фотоприёмниках на основе ИК квантовых точек. Напротив, исследования закономерностей фотопроцессов и роли в них различных типов лигандов, включая и галогенсодержащие, практически отсутствуют или имеют несистематический характер для ИК квантовых точек. Отмечается, что ИК фотодетекторы на основе

квантовых точек сульфида и селенида свинца нестабильны. Частичная замена лиганда или дополнительная пассивация галогенсодержащими прекурсорами также способствует росту устойчивости характеристик фотоприёмников, однако исследования, направленные на установление роли ионов галогена, механизмов деградации как электрофизических, так и фотолюминесцентных параметров к настоящему моменту времени отсутствуют. В работе обсуждаются ряд ключевых шагов на пути создания эффективных фотодетекторов ИК диапазона на коллоидных полупроводниковых КТ и перспективы дальнейшего развития и улучшения параметров, существующих детекторов такого типа.

Работа поддержана грантом РФФ № 22-12-00232

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ NI-SI-MO В МНОГОСЛОЙНЫХ КОРТОКПЕРИОДНЫХ СИСТЕМАХ ДО И ПОСЛЕ ОТЖИГА

Соломонов А.В.¹, Филатова Е.О.¹, Полковников В.Н.²

¹*Санкт-Петербургский государственный университет, Россия*

²*Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород, Россия*

В настоящее время перед рентгеновской оптикой, помимо задачи уменьшения длины волны, стоит цель расширения рабочего диапазона зеркал. Пара Ni/Si является перспективным материалом для использования в многослойных параболических зеркалах с переменным периодом по длине зеркала (рабочая длина волны 3.5 нм до 5 нм).

Метод магнетронного напыления является самым распространённым методом изготовления многослойных рентгеновских зеркал (МРЗ) с толщиной периода от 1 до 10 нм для исследовательских и промышленных целей. Однако, из-за ферромагнитных свойств Ni напыление зеркал на его основе не представляется возможным [1] без дополнительных технологических приемов. Одним из способов нивелирования магнитных свойств никеля является распыление мишени никеля, допированной молибденом. Допирование мишени никеля 20% молибдена нивелирует его ферромагнитные свойства, что позволяет напылять МРЗ NiMo/Si.

Кроме того, воздействие высоких температур и сильного потока излучения на зеркала могут приводить к значительному уменьшению его коэффициента отражения, поэтому необходимо изучение влияния термического воздействия на структуру NiMo/Si в широком диапазоне температур.

Целью данной работы было изучение взаимодействия Ni, Mo и Si в многослойных зеркалах с постоянным периодом до отжига и после отжига в диапазоне температур от 300°C до 600°C для дальнейшей разработки систем с переменным периодом.

С помощью рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии были получены Ni 2p, Si 2p и Mo3d спектры. Анализ Ni 2p спектров пленки чистого Ni и пленки NiMo указывает на взаимодействие Ni с Mo с образованием нового соединения NiMo_x.

Совместный анализ Ni 2p, и Si 2p спектров многослойной системы [NiMo(1.41нм)/Si(2.9нм)]₆₀ позволяет обнаружить образование новых соединений в системе в процессе отжига. Анализ Ni 2p спектра системы до отжига указывает на отсутствие как металлического Ni, так и NiMo_x в спектре. Наблюдаемый пик можно идентифицировать как Ni₂Si [2], что объясняется сильной диффузией кремния к поверхности [3] вследствие чего образуется новое соединение. В процессе отжига системы Si продолжает активно диффундировать к поверхности через слой Ni, вследствие чего уже при 300°C наблюдается зарождение нового соединения NiSi, которое более отчётливо проявляется в спектре образца после отжига при температуре 450°C. При дальнейшем повышении температуры отжига до 600°C наблюдается расширение пика, за счет добавления новой компоненты NiSi₂. Особый интерес представляет перераспределение интенсивностей Ni 2p 3/2 и Si 2p 3/2 компонент линий спектра на протяжении всего отжига. В процессе отжига до 450°C

интенсивность Ni 2p 3/2 компоненты падает, в то время как интенсивность компоненты Si 2p 3/2 растет. Однако, при отжиге до 600°C происходит резкий рост интенсивности Ni 2p 3/2 и падение интенсивности в Si 2p 3/2 компоненты линии спектра, что связано с диффузионной активностью кремния. При отжиге вплоть до 450°C в соединениях Ni-Si количество никеля превосходит содержание Si, однако, при 600°C ситуация меняется: количество Si в соединении становится больше, вследствие чего NiSi₂ начинает диффундировать к поверхности, что приводит к повышению интенсивности соответствующего пика.

Работа выполнена при поддержке фонда выполнена при поддержке гранта РФФИ №19-72-20125-П. Авторы также выражают свою благодарность Междисциплинарным ресурсным Центрам СПбГУ по направлению "Физические методы исследования поверхности"), "Рентгенодифракционные методы исследования" и НИЦ «Курчатовский институт» (Лабораторный модуль ЭСХА) за проведенные исследования.

1. Zhang H. et al. Cobalt sputtering target and sputter deposition of Co thin films for cobalt silicide metallization // Journal of Vacuum Science & Technology A. American Institute of Physics, 1999. Vol. 17, № 4. P. 1904–1910.

2. Cao Y., Nyborg L., Jelvestam U. XPS calibration study of thin-film nickel silicides // Surface and Interface Analysis. 2009. Vol. 41, № 6. P. 471–483.

3. Zalar A. et al. Interfacial reactions in dynamically heated Si/Me/Si sandwich layers // Thin Solid Films. Elsevier, 1994. Vol. 253, № 1–2. P. 293–298.

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ПЛАСТИФИЦИРУЮЩИХ ДОБАВОК НА СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИОННЫХ СУПЕРАБСОРБЕНТОВ КОМПЛЕКСОМ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ

Сорокин А.В., Лавлинская М.С.

e-mail: andrew.v.sorokin@gmail.com, тел.: 8 (473) 2208586

Композиционные суперабсорбенты (КСАП) представляют собой сетчатые полимеры, способные поглощать и удерживать количества воды в сотни раз превосходящие собственную массу и сочетающие в своем составе как синтетические, так и биodeградируемые звенья. Очевидным преимуществом материалов этого класса над синтетическими аналогами является их большая экологичность, обусловленная присутствием звеньев, способных разлагаться под действием окружающей среды. Однако КСАП уступают синтетическим аналогам в своей ключевой характеристике – способности поглощать воду, численно характеризуемой равновесной степенью набухания. Для решения этой проблемы нами предложено использование пластификатора дибутилсукцината, способного повысить на 51 % равновесную степень набухания композиционных суперабсорбентов на основе натриевой соли карбоксиметилцеллюлозы [1]. Однако к настоящему моменту подобные системы являются мало изученными, и недостаточно ясно за счет каких процессов происходит возрастание значений равновесной степени набухания в присутствии дибутилсукцината.

В связи с этим целью настоящей работы является выявление факторов, обуславливающих возрастание равновесной степени набухания композиционных суперабсорбентов на основе карбоксиметилцеллюлозы в присутствии дибутилсукцината комплексом физико-химических методов исследования.

Композиционные суперабсорбенты с различным содержанием натриевой соли карбоксиметилцеллюлозы (молекулярная масса – 10 кДа, степень замещения – 0.7) получали согласно методике, описанной в [1]. Равновесную степень набухания, Q_e , определяли гравиметрическим методом в дистиллированной воде при температуре 25 ± 2 °С.

В результате проведенных исследований установлено, что присутствие дибутилсукцината в концентрации 5 % масс. приводит к увеличению значений равновесной степени набухания КСАП, содержащих 10 и 20 % масс. натриевой соли карбоксиметилцеллюлозы, по сравнению с полимером, не содержащим добавок. Повышение концентрации пластификатора до 10 % масс. сопровождается уменьшением значений Q_e , снижение до 2 % масс. – не оказывает влияния на исследуемый параметр.

Для интерпретации полученных результатов синтезированные КСАП были изучены с помощью методов ИК-спектроскопии, дифференциальной сканирующей калориметрии и дифракции рентгеновских лучей. В результате проведенных исследований установлено, что дибутилсукцинат преимущественно взаимодействует со звеньями полисахарида, блокируя образования

внутримолекулярных водородных связей, что повышает стерическую доступность сорбционных центров, взаимодействующих с молекулами воды.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 24-23-20008).

1. Sorokin A., Sukhanov P., Popov V., Kannykin S., Lavlinskaya M., Cellulose, 2022, 29, 159-173.

АТОМНАЯ СТРУКТУРА И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЦЕНТРОВ МЕТАЛЛОВ В СТЕКЛАХ $ZnO-P_2O_5$, ОДНОКРАТНО ДОПИРОВАННЫХ АТОМАМИ Ag, Au, Rb, Nd И Er

В.В. Срабионян¹, М.П. Ветчинников², Е.М. Зинина², Е.С. Игнатьева², К.И. Рунина², Д.С. Рубаник¹, В.А. Дурыманов¹, И.А. Викленко¹, И.В. Панков¹, Е.В. Храмов³, А.А. Велигжанин³, Л.А. Авакян¹, Г.Ю. Шахгильдян², В.Н. Сигаев², Л.А. Бугаев¹

¹ ЮФУ, Ростов-на-Дону, Россия

² РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

³ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
e-mail: vvsrab@sfedu.ru, тел.: 8 (951) 4994960

Одним из перспективных подходов к усилению люминесценции редкоземельных (РЗ) ионов в лазерных средах является сенсбилизация ионов за счет их взаимодействия с плазмонными наночастицами (НЧ). Установленные механизмы таких взаимодействий показали зависимость усиления люминесценции от множества факторов, требующих тщательного подбора исходных компонентов, их концентраций, методов и условий синтеза материалов (НЧ-РЗ-ионы)/стекло, а также понимания структурных состояний выбранных компонентов и их трансформации в ходе синтеза.

В настоящей работе взаимодополняющими методами электронной микроскопии и энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ТЕМ-EDX), Рамановской и оптической спектроскопий, спектроскопии рентгеновского поглощения (XAS) изучено влияние примесей плазмонных Ag, Au, Rb и РЗ металлов на структуру и оптические свойства цинк-фосфатных (PZ) стекол, синтезированных методом закалки из расплава (MQ). Получено однородное распределение и отсутствие агломераций металлических добавок по объему образцов. Однако для Au-содержащих PZ стекол при увеличении концентрации Au до 0,016 мол. % без дополнительных внешних обработок образовывались Au НЧ со средним размером 2,5 нм. Выявлено кристаллохимическое подобие локальных структур Ag, Rb, Nd, Er в PZ стеклах и в конкретных кристаллах соответствующего химического состава, а также особенности реализации этого принципа для каждого из легированных стекол. Определены параметры локальной структуры металлов. Для Nd, Er эти параметры и абсорбционно-люминесцентные характеристики показали, что MQ для PZ-стекла сохраняет ионные состояния Nd^{3+} и Er^{3+} .

Полученные структурные и люминесцентные характеристики синтезированных PZ-стекло создают основу для их дальнейшего совместного легирования подходящими парами рассматриваемых добавок для создания композитных систем (плазмонные металлы – РЗ ионы)/PZ-стекло с настраиваемым локализованным поверхностным плазмонным резонансом НЧ за счет дополнительных внешних обработок и усиленной люминесценцией.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 23-12-00102. <https://rscf.ru/project/23-12-00102/>

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СМЕШАННЫХ ТЕЛЛУРИДОВ МАРГАНЦА, ИНДИЯ И ВИСМУТА

Стребко К.С.¹, Фролов А.С.^{1,2}, Сергеев А.И.

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

² МФТИ, Москва, Россия

e-mail: kirills_str@mail.ru, тел.: 8 (967) 3575721

Топологические изоляторы – материалы, по своим объёмным свойствам являющиеся диэлектриками, а по поверхностным – электронными проводниками. Из-за сильного спин-орбитального взаимодействия в данных материалах происходит инверсия зоны проводимости и валентной зоны. На поверхности топологических изоляторов реализуются металлические спин-поляризованные состояния (конус Дирака) за счёт их зонной структуры и симметрии относительного обращения во времени. К классу таких материалов относится $MnBi_2Te_4$, причём магнитные свойства марганца нарушают симметрию относительно времени, из-за чего в спектре топологических состояний наблюдается магнитная щель. Данные свойства материала могут быть применены в области квантовых технологий. Перспективным выглядит добавление к спин-орбитальным и магнитным свойствам сверхпроводимости. Этого можно добиться легированием $MnBi_2Te_4$ с помощью индия. Подобного результата стоит ожидать, так как легирование родственного топологического изолятора $SnBi_2Te_4$ приводит к проявлению сверхпроводящих свойств [1].

В рамках данной работы проводился синтез легированных индием составов $Mn(In_xBi_{1-x})_2Te_4$ ($x=0.05-0.25$). Синтез кристаллов всех составов был проведён с помощью модифицированного метода Бриджмена. Для проведения синтезов использовались данные дифференциального термического анализа (ДТА) о температурах кристаллизации расплавов соответствующих составов. Полученные образцы были диагностированы с помощью методов рентгеновской флуоресцентной спектроскопии (РФЛС) и рентгенофазового анализа (РФА). Данные анализов подтвердили, что были получены фазы синтезированных составов.

Топологические изоляторы необходимо изучать с помощью фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР), поскольку это единственный способ изучения поверхностных состояний топологических изоляторов, особенно в случае исследуемых составов, так как вблизи уровня Ферми меняется дисперсия зон за счёт действия магнетизма и сверхпроводимости. С помощью ФЭСУР были исследованы образцы составов $Mn(In_xBi_{1-x})_2Te_4$. Увеличение доли индия в кристалле приводит к увеличению наблюдаемой запрещённой зоны. Рост величины объёмной запрещённой зоны следует по закону, близком к линейному. Можно предположить, что в системе $Mn(In_xBi_{1-x})_2Te_4$ происходит переход топологический – тривиальный изолятор, а увеличение наблюдаемой ФЭСУР ширины запрещённой зоны связано с появлением в ней примесных состояний атомов индия.

Транспортные свойства всех синтезированных монокристаллов $Mn(In_xBi_{1-x})_2Te_4$ были исследованы вплоть до температур 50 мК. Было обнаружено, что ни один из синтезированных кристаллов не проявляет сверхпроводящих свойств в

исследованном диапазоне температур. Можно сделать вывод, что этих свойств можно добиться при мольной доле индия $x > 0.25$.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (# 23-72-00020).

1. Michael A. McGuire, Heda Zhang, Andrew F. May, Satoshi Okamoto, Robert G. Moore, Xiaoping Wang, Clément Girod, Sean M. Thomas, Filip Ronning, and Jiaqiang Yan. Phys. Rev. Materials 7, 034802 – Published 31 March 2023

ИССЛЕДОВАНИЕ РАСТВОРЕНИЯ НАНОНИТЕЙ И НАНОЧАСТИЦ КРЕМНИЯ РАЗЛИЧНЫХ МОРФОЛОГИЙ В БУФЕРНЫХ РАСТВОРАХ ПРИ РАЗНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ pH

*Сумарокова М.В.¹, Назаровская Д.А.¹, Крюков Р.Н.², Гончар К.А.¹,
Николичев Д.Е.², Осминкина Л.А.^{1,2}*

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

*2 Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

3 Институт биологического приборостроения РАН, Пущино, Россия

e-mail: sumarokova.mv21@physics.msu.ru

Пористые наночастицы кремния являются перспективным материалом для биомедицинских применений из за их уникальных полупроводниковых свойств и свойств биосовместимости и биodeградируемости. В работе [1,2] показано, что скоростью биodeградации наночастиц можно управлять, задавая параметры их синтеза и последующей обработки поверхности. Однако, в первую очередь на скорость растворения наночастиц кремния влияют их структурные свойства и значения pH среды, в которой они находятся. В работах [2,3] показано, что спектроскопия комбинационного рассеяния света является прекрасным инструментом для исследования скорости растворения кремниевых нанокристаллов.

В представленной работе пористые кремниевые нанонити (пКНН) синтезировали методом металл-стимулированного химического травления (МСХТ) пластин кристаллического кремния c-Si с удельным сопротивлением 0.001 Ом·см. Инициатором реакции МСХТ служили наночастицы золота (Au). Пористые наночастицы кремния (пКНЧ) получали измельчением пКНН в ультразвуковой ванне. Непористые кремниевые нанонити нКНН получали в результате травления c-Si с удельным сопротивлением 10 Ом·см, а их измельчение давало непористые наночастицы (нКНЧ).

На Рисунке 1 представлены микрофотографии сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) полученных образцов нанонитей. Толщины слоев пКНН и нКНН составляют около 4 и 5 мкм соответственно, а диаметр единичной нанонити около 50 нм.

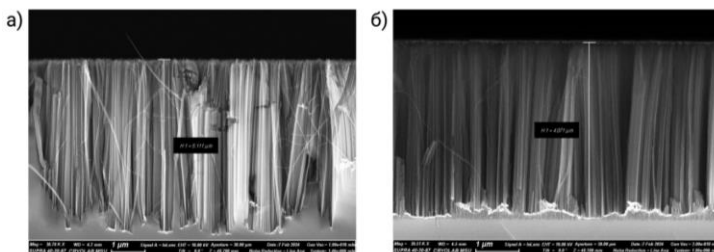


Рисунок 1 – Микрофотографии СЭМ непористых (а) и пористых (б) кремниевых нанонитей.

Методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФС), обеспечивающим возможность детального анализа локального химического состава наносистем, было определено содержание субоксидов кремния (SiO_x) на поверхности исследуемых образцов. Установлено, что концентрация субоксидов на поверхности непористых кремниевых нанонитей (нКНН) составляет около 30%, а на поверхности пористых кремниевых нанонитей (пКНН) — около 26%. Данные различия могут оказывать влияние на скорость растворения образцов в биологических средах.

Для исследования процессов растворения кремниевых нанонитей и наночастиц был применён метод комбинационного рассеяния света (КРС или рамановская спектроскопия). Образцы помещали в буферные растворы с различными значениями pH (4.6, 7.0 и 9.0), моделирующие физиологические условия. Рамановские спектры регистрировались с использованием микроспектрометра Confotec MR350 с длиной волны лазера 633 нм и мощностью 0.5 мВт. Кроме того, изменение толщины кремниевых нанонитей во времени изучали с помощью сканирующей электронной микроскопии (СЭМ, Carl Zeiss SUPRA 40).

Проведённые исследования показали, что скорость растворения кремниевых нанонитей и наночастиц существенно зависит от их морфологии и кислотности среды. ПКНН растворяются значительно быстрее, чем нКНН, особенно в щелочных буферных растворах. Это указывает на возможность контролируемого растворения наноструктур, что может быть использовано для разработки биосенсоров и наноконтейнеров для целевой доставки лекарственных препаратов.

Полученные результаты дают основу для дальнейшей оптимизации кремниевых наноматериалов в биомедицинских приложениях, с учётом их поведения в различных физиологических средах.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 24-15-00137).

1. Gongalsky, M. B., Tsurikova, U. A., Storey, C. J., Evstratova, Y. V., Kudryavtsev, A. A., Canham, L. T., Osminkina, L. A. (2020). The effects of drying technique and surface pre-treatment on the cytotoxicity and dissolution rate of luminescent porous silicon quantum dots in model fluids and living cells. *Faraday Discussions*, 222, 318-331.

2. Gongalsky, M. B., Sviridov, A. P., Bezsudnova, Y. I., Osminkina, L. A. (2020). Biodegradation model of porous silicon nanoparticles. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 190, 110946.

3. Gongalsky, M. B., Tsurikova, U. Y. A., Gonchar, K. A., Gvindgiiiiia, G. Z., Osminkina, L. A. (2021). Quantum-confinement effect in silicon nanocrystals during their dissolution in model biological fluids. *Semiconductors*, 55, 61-65.H

4. A.V. Boryakov, S.I. Surodin, R.N. Kryukov, D.E. Nikolichev, S.Yu. Zubkov (2018). Spectral fit refinement in XPS analysis technique and its practical applications. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 229, 132-140.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СОСТОЯНИЙ РАШБЫ И ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ В СИСТЕМАХ $Mn_{1-x}Sn_xBi_2Te_4$

Тарасов А.В.^{1,2}, Фролов А.С.², Ерыженков А.В.¹, Шикин А.М.¹

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

² Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия
e-mail: artem.tarasov@spbu.ru, тел.: 8 (960) 2789996

Топологические квантовые материалы представляют собой важное направление современной физики благодаря своим уникальным электронным свойствам, таким как наличие топологических поверхностных состояний (ТПС), которые возникают на границе между топологическим и тривиальным материалами и защищены симметрией обращения времени. Именно эта симметрия обеспечивает устойчивость ТПС к локальным возмущениям, предотвращая рассеяние электронов и делая такие материалы перспективными для применения в квантовых вычислениях и спинтронике [1]. Важную роль в этих материалах также могут играть состояния Рашбы, возникающие из-за сильного спин-орбитального взаимодействия, что открывает дополнительные возможности для управления их электронными и спиновыми свойствами [2].

Одним из перспективных объектов исследования в этой области являются системы $Mn_{1-x}Sn_xBi_2Te_4$, которые представляют собой смесь магнитного топологического изолятора $MnBi_2Te_4$ и немагнитного топологического изолятора $SnBi_2Te_4$. В нашей предыдущей работе [3] было показано, что сложная гибридизация орбиталей $Te-p_z$ и $Bi-p_z$ с орбиталями Sn и Mn приводит к возникновению различных топологических фаз в зависимости от концентрации Sn , что предполагает возможность топологических фазовых переходов. Эти результаты указывают на важность исследования взаимодействия между различными электронными состояниями в данных системах. В частности, целью настоящего исследования стало изучение гибридизации состояний Рашбы с топологическими поверхностными состояниями в системах $Mn_{1-x}Sn_xBi_2Te_4$. Мы стремимся понять, как изменение концентрации Sn влияет на энергетическое положение состояний Рашбы, их взаимодействие с топологическими поверхностными состояниями, а также на величину расщепления Рашбы.

Основным инструментом исследования являлись расчеты в рамках теории функционала плотности (ТФП), которые позволили моделировать электронную структуру материалов и анализировать влияние различных факторов на их свойства. Для экспериментальной проверки теоретических предсказаний были проведены измерения фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР) с использованием излучения $He\ I\alpha$ ($h\nu = 21,2$ эВ) в Институте физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН (Новосибирск, Россия), а также лазерные μ -ARPES эксперименты с энергией фотонов $h\nu = 6,3$ эВ на станции HiSOR (Хиросима, Япония).

Наши результаты показывают, что увеличение концентрации олова Sn приводит к смещению состояний Рашбы ближе к уровню Ферми, что усиливает их взаимодействие с топологическими поверхностными состояниями. При этом наблюдается постепенное увеличение расщепления состояний Рашбы по мере замещения марганца оловом, что оказывает значительное влияние на спиновые и электронные свойства материала. Управляемая гибридизация состояний Рашбы и топологических поверхностных состояний в таких системах предоставляет перспективные пути для контроля спиновых свойств и создания новых технологий.

Работа проведена в рамках и при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-12-00016).

1. Hasan M.Z., et al. Rev. Mod. Phys., 2010, 82, 3045-3067.
2. Li X., et al. Nat. Rev. Phys., 2021, 3, 392–403.
3. A.V. Tarasov, et al. Symmetry, 2023, 15, 469.

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И ПРИРОДЫ ХИМИЧЕСКОЙ СВЯЗИ В NoO_2

Тетерин Ю.А. (мл.)^{1,2}, Рьжков М.В.³, Путков А.Е.², Маслаков К.И.^{1,2}, Тетерин
А.Ю.², Иванов К.Е.², Калмыков С.Н.¹, Петров В.Г.¹

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
Москва, Россия

²НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

³Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия
e-mail: Teterin_YA@nrcki.ru, тел.: 8 (499) 1969252

Релятивистским методом дискретного варьирования (РДВ) рассчитано электронное строение NoO_2 , построена схема молекулярных орбиталей (МО) (рис. 1), необходимая для расшифровки рентгеновских спектров (фотоэлектронных, конверсионных, эмиссионных, поглощения и т.д.). С учетом состава МО и сечений фотоэффекта определены теоретические интенсивности спектра РФЭС (рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии) валентных электронов NoO_2 в диапазоне энергий связи от 0 до -40 эВ и построена гистограмма такого спектра.

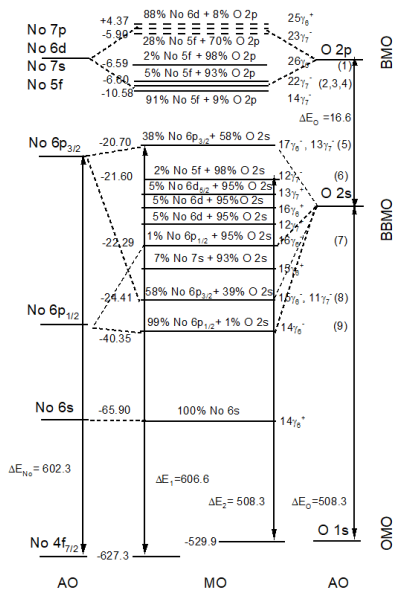


Рис. 1. Схема МО NoO_2 . Вакантные МО обозначены штрихами, а занятые МО – сплошными горизонтальными линиями. Слева приведены рассчитанные значения энергий связи электронов (эВ). Над горизонтальными прямыми дан состав МО в %. Справа отмечены обозначения МО, а в скобках – номера групп МО. Энергетический масштаб не выдержан.

На гистограмме спектра РФЭС валентных электронов NoO_2 наблюдается сложная структура. В диапазоне от 0 до ~15 эВ она связана с электронами внешних валентных (ВМО). Интенсивность этой полосы в основном связана с No 5f- и 6d-электронами, так как сечение фотоэффекта для этих электронов значительно больше, чем у No 7s-, 7p- и O 2p-электронов. В диапазоне от ~15 до ~40 эВ в сложную структуру вносят вклад электроны внутренних валентных МО (ВВМО). Интенсивность линий ВВМО в большой степени связана с No $6r_{3/2}$ - и O 2s-электронами.

С учетом валентной атомной конфигурации No $6s^2 6p^6 5f^{14} 6d^0 7s^2 7p^0$ и рассчитанной на основе состава МО (РДВ) ионной конфигурации No $6s^2 6p^6 5f^{13.44} 6d^{1.28} 7s^{0.24} 7p^{0.58}$ для NoO_2 можно найти, что эффективный заряд нобелия равен +0.46 e. Эта величина существенно меньше +4, принимаемого в ионном приближении, и характеризует определяющую роль ковалентных эффектов в NoO_2 . Такая величина эффективного заряда свидетельствует о высоком вкладе ковалентной составляющей в химическую связь и согласуется с данными, полученными для диоксидов более легких актиноидов [1,2].

Из результатов расчета заселенностей перекрывания АО No и O по Малликену найдено, что электроны ВВМО на ~35 % ослабляют химическую связь в NoO_2 , обусловленную электронами ВМО.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт» и государственного задания Института химии твердого тела УрО РАН (тема №_124020600024-5).

1. Putkov A.E., Teterin Yu.A., Ryzhkov M.V., Maslakov K.I., Teterin A.Yu., Ivanov K.E., Kalmykov S.N., Petrov V.G., Radiochemistry, 2021, 63(4), 401 – 412.

2. Teterin Yu.A., Putkov A.E., Ryzhkov M.V., Maslakov K.I., Teterin A.Yu., Ivanov K.E., Kalmykov S.N., Petrov V.G., Mendeleev Communications, 2023, 33(5), 605 – 607.

МИКРОСТРУКТУРНЫЕ И ГИДРОФИЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ОБРАЗЦОВ ПОЛИМЕРА ПОЛИЛАКТИДА С РАЗЛИЧНЫМИ РИСУНКАМИ 3D-ПЕЧАТИ

Фролова В.Е.¹, Леньшин А.С.¹, Домашевская Э.П.¹, Руднева И.Г.², Черненко С.С.², Канныкин С.В.¹

¹ *Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

² *Воронежский государственный технический университет, Воронеж, Россия*

e-mail: ternovaya@phys.vsu.ru, тел.: 8 (951) 8715347

В последнее время полилактид (Polylactic Acid - PLA) привлекает все большее внимание исследователей, поскольку является одним из наиболее перспективных термопластичных полимеров. Универсальность PLA тесно связана с одним из его главных преимуществ - способностью к биологическому разложению.

В виде нити/филамента PLA широко используется при 3D-печати, является удобным в обращении и, как правило, не требует постобработки после печати.

Цель работы – исследование влияния процесса 3D-печати последовательным наложением слоев полимера полилактида PLA способом FDM (Fused Deposition Modeling) на микроструктурные и гидрофильные свойства образцов полилактида с различными модельными рисунками печати [1].

Образцы для исследования были изготовлены из филамента PLA диаметром 1.75 мм на 3D- принтере Hercules Original методом послойного наложения слоев полимера FDM. Температура экструдера составляет 260°C, мощность-500 Вт. В ходе работы были напечатаны 5 образцов цилиндрической формы диаметром 20 мм и толщиной 5 мм. Напечатанные образцы отличались рисунками 3D печати (пять модельных типов).

Рентгенофазовый анализ на дифрактометре ARLX[®]TRA в интервале углов $2\theta = 2-40^\circ$ на $\text{Cu K}_{\alpha 1}$ -излучении обнаружил частичную кристаллизацию полимерных цепей аморфного PLA в напечатанных образцах, которая происходит при тепловом и механическом воздействиях на исходный аморфный нитевидный образец в процессе 3D-печати в разной степени, зависящей от геометрии рисунка и морфологии его поверхности.

При этом данные инфракрасной спектроскопии, полученные на ИК-Фурье спектрометре Bruker Vertex 70 обнаруживают сохранение всех внутримолекулярных химических связей полилактида.

Полученные на оригинальной установке для измерения адсорбционных свойств образцов, значения краевых углов смачивания находятся в интервале $\varphi = 50-60^\circ$, что указывает на гидрофильный характер поверхности образцов. При общей гидрофильности всех напечатанных образцов обнаружено влияние различной геометрии модельного рисунка не только на морфологию поверхности из микрофотографий РЭМ, но и на её смачиваемость [2].

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ частично в рамках госзадания для университетов в области научной деятельности, проект

№. ФЗГУ-2023-006, и Соглашения N 075-15-2021-1351 в части РЭМ исследований.

1. Леньшин А.С., Фролова В.Е., Ивков С.А., Домашевская Э.П. Микроструктурные и гидрофильные свойства образцов полимера полиэтилентерефталат-гликоля с различными рисунками 3D-печати. Конденсированные среды и межфазные границы, 2024, 26 (1), 78-87.

2. Alexandr S. Lenshin, Vera E. Frolova, Sergey V. Kannykin, Evelina P. Domashevskaya. Microstructural and hydrophilic properties of polylactide polymer samples with various 3D printing patterns. Polymers, 2024, 9 (16), 1281.

ПРОБЛЕМА АНАЛИЗА ПЕРЕКРЫВАЮЩИХСЯ EXAFS СПЕКТРОВ НА ПРИМЕРЕ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Хаметова Э.Ф., Бакиева О.Р., Немцова О.М.

УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия

e-mail: elinaphanilevna851@gmail.com, тел.: 8 (3412) 43-18-94

Не сегодняшний день EXAFS спектроскопия является основным инструментом для исследования локальной атомной структуры материалов. Однако до сих пор у исследователей возникают трудности при анализе сложных материалов, содержащих химические элементы с близкими значениями атомного номера. В этом случае экспериментальные спектры содержат наложение сигнала от нескольких химических элементов. Анализировать такие спектры классическим методом Фурье преобразования не представляется возможным. Подобная проблема существует во множестве областей экспериментальных методов, где происходит регистрация различных сигналов. Ранее эта проблема была решена в спектроскопии энергетических потерь электронов (EXELFS). Был разработан метод анализа, позволяющий определять параметры локальной атомной структуры по спектрам, содержащим наложение сигнала атома Cu на сигнал атома Mn.

Целью настоящей работы являлось адаптировать, разработанный ранее метод для решения проблемы перекрывающихся сигналов в EXELFS спектроскопии. Тестовым объектом являлось соединение AuPt, имеющее кубическую ГЦК структуру и параметры решетки $a = 3.996 \text{ \AA}$, $\alpha = 90^\circ$. Разница между краями составляет 354 эВ, что является недостаточным для корректного анализа методом Фурье-преобразования. Был построен модельный спектр AuPt и проведен его анализ методом решения некорректно поставленной обратной задачи.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351 в части развития методик рентгеновской фотоэлектронной и абсорбционной спектроскопии.

ИССЛЕДОВАНИЕ РАЗОГРЕВА СУСПЕНЗИЙ КОМПОЗИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ КРЕМНИЙ-ЗОЛОТО ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНОГО ОБЛУЧЕНИЯ

Б.Р.Хамитов¹, Л.А.Осминкина^{1,2}

1 Московский государственный университет М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва

*2 Институт биологического приборостроения РАН, Пуцино, Россия
e-mail: baxtiar5@yandex.ru, тел.: 8 (917) 7786040*

Гибридные наночастицы, сочетающие пористый кремний и золото, объединяют преимущества обоих материалов и могут быть использованы для создания высокоэффективных систем нагрева при облучении светом в инфракрасном диапазоне. Сочетание кремниевых и золотых наночастиц позволяет не только улучшить поглощение света, но и обеспечить точное целевое нагревание клеток, минимизируя повреждение окружающих здоровых тканей [1].

Цель данной работы была исследовать процессы разогрева суспензий гибридных наночастиц пористый кремний-золото (Au@pSiNPs) для применения в фототермической терапии (ФТТ) [2, 3]. В рамках исследования был проведен синтез таких наночастиц полный, анализ их структурных и оптических свойств, а также проведены экспериментальные измерения эффективности их разогрева под воздействием инфракрасного излучения, а также выживаемость клеток при введении наночастиц Au@pSiNPs в живые клетки (in vitro).

Размеры полученных гибридных наночастиц были оценены методом динамического светорассеяния (DLS), и составил 80 нм. Исследование морфологии с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) подтвердило наличие пористой структуры частиц, что способствует эффективной загрузки в их поры наночастиц золота. Метод ИК-спектроскопии позволил идентифицировать ОН-группы на поверхности частиц, указывая на возможность модификации поверхности полиэтиленгликолем (mPEG-silane) для увеличения их биосовместимости. Спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС) показала, что рамановский сдвиг $513,3 \text{ cm}^{-1}$ соответствует нанокристаллу с диаметром 1,9 нм.

Фототермическая активность Au@pSiNPs была исследована в экспериментах с красным лазером длиной волны 632 нм и мощностью 400 мВт. Полученные данные свидетельствуют о высокой эффективности нагрева частиц. Зависимость скорости нагрева существенно зависела от концентрации и мощности лазерного излучения наночастиц и состоит в температурном интервале от 25 до 50 °С. Наночастицы, модифицированные PEG, продемонстрировали уменьшение токсичности, что делает их перспективными для применения в биомедицинских целях.

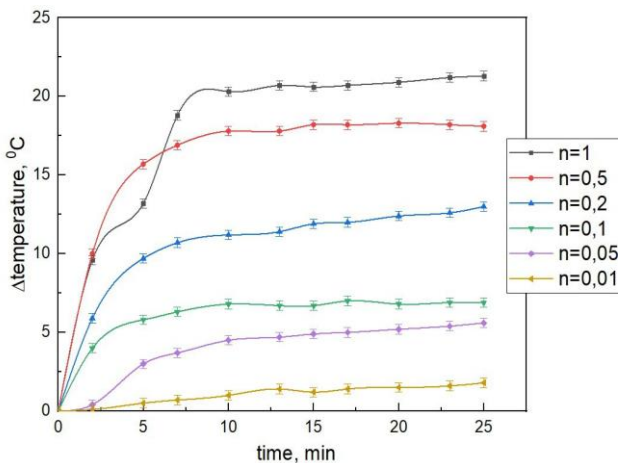


Рис.1 Экспериментальные кривые скорости нагрева Au@pSiNPs от времени с разными концентрациями

Результаты исследования подтвердили высокую эффективность разогрева гибридных наночастиц Au@pSiNPs, что открывает возможности для их использования в фототермической терапии.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 24-15-00137).

1. Jane, A., et al., Porous silicon biosensors on the advance. Trends Biotechnol, 2009. 27(4): p. 230-9.

2. Huang X, Jain PK, El-Sayed IH, El-Sayed MA: Determination of the minimum temperature required for selective photothermal destruction of cancer cells using immunotargeted gold nanoparticles. Photochem Photobiol 2006, 82:412.

3. Hong, C. Porous silicon nanoparticles for cancer photothermotherapy / C. Hong, J. Lee, H. Zheng, S.-S. Hong, C. Lee // Nanoscale Res. Lett. – 2011. – Vol. 6. – P. 321. – DOI: 10.1186 / 1556-276X-6-321.

ВЛИЯНИЕ ДОЛИ НИОБИЯ НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЁНОК Nb-Si, ПОЛУЧЕННЫХ МАГНЕТРОННЫМ РАСПЫЛЕНИЕМ

Хыдырова С.Ю.¹, Барков К.А.², Терехов В.А.², Моисеев К.М.¹, Ивков С.А.², Керсновский Е.С.², Польшин И.В.², Новолокина Н.В.², Коржова Т.А.²

¹ МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

² Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

e-mail: hydyrova@bmstu.ru, тел.: 8 (925) 2973660

Плётки Nb_xSi_{1-x} являются перспективным материалом для использования в сверхпроводниковых однофотонных детекторах ИК излучения. Однако при осаждении плёнок Nb-Si методом магнетронного распыления могут формироваться метастабильные фазы, отсутствующие на диаграммах состояния [1]. Наличие в составе плёнок Nb-Si метастабильных соединений может существенно сказываться на их функциональных свойствах. Поэтому вопросы диагностики структуры и фазового состава подобных объектов важны и актуальны.

Исследуемые плётки Nb_xSi_{1-x} были получены на кремниевых Si(100) подложках совместным магнетронным распылением двух мишеней – ниобия и кремния – на установке ВУП-11М. Атомный состав плёнок Nb_xSi_{1-x} варьировался в пределах значений x от 50 до 85. Рассчитанная толщина пленок составляла 100 нм. Фазовый состав плёнок Nb_xSi_{1-x} определялся методами рентгеновской дифракции с использованием дифрактометра ДРОН 4-07. Электронное строение пленок анализировалось по рентгеновским эмиссионным Si $L_{2,3}$ -спектрам с помощью уникального метода ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС) на спектрометре РСМ-500 [2].

По данным рентгеновской дифракции все плётки Nb_xSi_{1-x} , полученные совместным магнетронным распылением Nb и Si, являются рентгеноаморфными. В то же время по данным УМРЭС основу плётки $Nb_{50}Si_{50}$ с наименьшим содержанием ниобия составляет фаза высшего силицида $NbSi_2$ (~50%), а также обнаружено формирование значительного количества фазы низшего силицида Nb_5Si_3 (~40%). Кроме того, часть атомов кремния в плётке $Nb_{50}Si_{50}$ окисляется с образованием SiO_2 (~10%). Увеличение содержания ниобия до 65 ат.% приводит к значительному увеличению фазы Nb_5Si_3 до 75 % и снижению содержания фазы $NbSi_2$ до 25 %. Кроме того, окисления кремния не обнаружено. Дальнейшее увеличение содержания ниобия до 75 ат.% приводит к небольшому росту содержания фазы Nb_5Si_3 до 80 % и снижению содержания высшего силицида $NbSi_2$. При этом в случае пленки $Nb_{85}Si_{15}$ с максимальным содержанием Nb обнаруживается формирование только фазы низшего силицида Nb_5Si_3 .

Увеличение содержания ниобия в плётках Nb_xSi_{1-x} с 50 до 85 ат.% приводит к уменьшению удельного сопротивления от $7 \cdot 10^4$ до $1,8 \cdot 10^4$ Ом·см.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10294, <https://rscf.ru/project/23-79-10294/>.

1. Pan Y., Guan W.M., Journal Ceramics International, 2019, 45, 15649.

2. Зимкина Т. М. Ультрамягкая рентгеновская спектроскопия. Изд-во Ленинградского университета, 1971. 132 С.

НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛАЗМОННЫХ НАНОЧАСТИЦ РАЗНОЙ ГЕОМЕТРИИ В ПОЛЕ 10 НАНОСЕКУНДНЫХ ИМПУЛЬСОВ ВТОРОЙ ГАРМОНИКИ YAG:Nd³⁺ ЛАЗЕРА (532 нм)

Чевычелова Т.А., Звягин А.И., Смирнов М.С., Овчинников О.В.

*Воронежский государственный университет, РФ, Воронеж
e-mail: t.chevychelova@rambler.ru*

Нелинейно-оптический отклик от ансамблей плазмонных наночастиц (НЧ) является предметом многочисленных исследований методом Z-сканирования [1]. Метод Z-сканирования заключается в определении зависимости коэффициента нормализованного пропускания лазерного излучения исследуемым образцом от его положения относительно перетяжки сходящегося гауссова пучка [2]. Основная проблема заключается в определении причин изменения коэффициента поглощения или преломления. В частности, в условиях действия высокоинтенсивных лазерных импульсов требуется рассмотрение и оценка вклада в наблюдаемые нелинейно-оптические эффекты процессов структурной перестройки НЧ. Однако, в литературе подобные оценки отсутствуют.

Представлены результаты исследования методом Z-сканирования нелинейно-оптических свойств плазмонных наностержней золота (НСт Au) средним размером 6x18 нм, наносфер золота и серебра (НЧ Au и НЧ Ag) диаметром 15 нм и 20 нм, соответственно, и треугольных нанопризм серебра (НТ Ag) средним размером ребра 38 нм в поле 10 нс лазерных импульсов с длиной волны 532 нм и энергией 0.16 мДж с частотой повторения 1 Гц в диапазоне интенсивностей падающего излучения от 10 МВт·см⁻² до 10 ГВт·см⁻².

Z-сканы всех исследуемых образцов НЧ демонстрировали увеличение нормализованного пропускания, формирующее широкий контур просветления, симметричный относительно фокальной плоскости линзы ($Z = 0$), а затем резкое его уменьшение. При повторном воздействии импульсов той же энергии контур просветления исчезал. С помощью математической обработки Z-сканов, были построены зависимости нормализованного пропускания от интенсивности зондирующего излучения, позволяющие наглядно сравнить уровень просветления растворов НСт Au и определить пороговые интенсивности начала просветления растворов НСт Au, НЧ Au, НТ Ag и НЧ Ag, составившие 17, 14, 5 и 6 МВт·см⁻², соответственно (рис. 1, а). Вместе с этим был осуществлен анализ ПЭМ-изображений образцов НСт Au (рис. 1, б,е), НЧ Au (рис.1, с,ф) и НТ Ag (рис. 1, д,г) до и после воздействия лазерных импульсов, который показал разрушение исходных НЧ с образованием наносфер средним размером 4 нм независимо от размера и формы исходных НЧ.

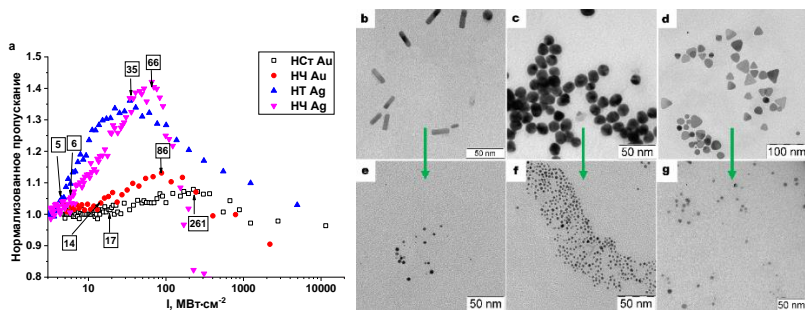


Рис. 1. Зависимость нормализованного пропускания исследуемых образцов (а) ПЭМ-изображения НСт Au (b, e) НЧ Au (c, f) и HT Ag (d, g) до и после воздействия лазерного излучения, соответственно

Структурная перестройка приводила к резким изменениям в спектрах экстинкции света образцами НЧ (рис.2). Длинноволновый пик в спектре экстинкции света НСт Au (626 нм), связанный с продольными коллективными колебаниями электронов, распространяющимися вдоль НСт, после последовательного воздействия импульсов лазерного излучения исчезает (рис. 2, а, синяя кривая). Оставшийся единственный коротковолновый пик (516 нм) соответствует экстинкции света золотыми наносферами. Исчезновение длинноволнового (560 нм) и формирование коротковолнового (410 нм) пика аналогично происходит в спектре HT Ag (рис. 2, b). В случае НЧ Au и Ag единственный пик смещается в коротковолновую сторону от 520 до 516 нм и от 430 до 410 нм, соответственно. Наблюдаемая трансформация спектров экстинкции света НЧ приводит к уменьшению оптической плотности на длине волны зондирующего излучения 532 нм (рис. 2), что коррелирует с ростом нормализованного пропускания (рис. 1). На основании установленных закономерностей сделано заключение о том, что воздействие лазерных импульсов высокой интенсивности приводит к структурной перестройке НЧ, проявляющейся в виде широкого контура просветления в Z-сканах (рис. 1).

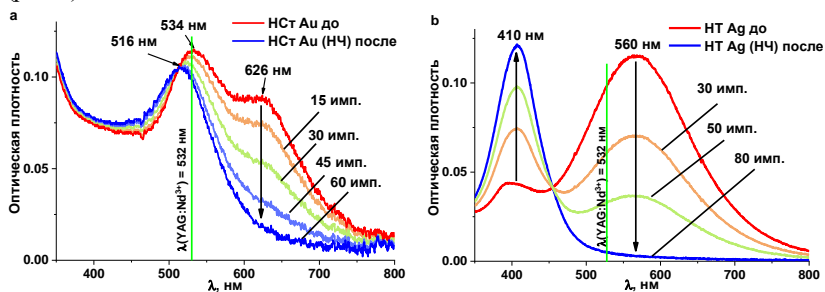


Рис. 2. Спектры экстинкции света исследуемых образцов НСт Au (а) и HT Ag (b) до и после воздействия лазерных импульсов с энергией 0.16 мДж

Для выяснения преимущественного механизма структурной перестройки [3] была рассмотрена временная динамика электронных возбуждений в НСт Au и НЧ Au, полученная методом фемтосекундной спектроскопии наведенного поглощения под действием 150 фс лазерных импульсов с длиной волны 400 нм. Установленные константы электрон-фононного взаимодействия ($\gamma_{\text{НСт}} = 12 \cdot 10^{16} \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-3} \cdot \text{К}^{-1}$, $\gamma_{\text{НЧ}} = 7 \cdot 10^{16} \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-3} \cdot \text{К}^{-1}$) и тепловых потерь в окружающую среду ($h_{\text{НСт}} = 16 \cdot 10^8 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-1}$, $h_{\text{НЧ}} = 8 \cdot 10^8 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-1}$) позволили рассчитать максимальную температуру решетки НЧ при нагреве под действием лазерного излучения в рамках двухтемпературной модели. Температура нагрева НСт Au и НЧ Au превышала температуру плавления золота. Учитывая, что 10 нс длительность импульсов YAG:Nd³⁺ лазера превышает время тепловой диффузии в НЧ (50-100 пс), можно исключить механизмы структурной перестройки такие как кулоновский взрыв и фрагментация НЧ, происходящие на более ранних стадиях температурной релаксации. Таким образом, механизмом структурной перестройки НЧ является плавление.

В данной работе обнаружена корреляция между наблюдаемым в Z-сканах просветлением и структурной перестройкой НЧ Au и Ag различной геометрии по механизму плавления.

Работа выполнена при поддержке государственного задания вузам (№FZGU-2023- 0007).

1. Zhang Y.-xi, Wang Y.-hua, RSC Adv., 2017, 7, 45129-45144.
2. Sheik-Bahae M., Said A., Wei T. [et. al], IEEE J. Quantum Electron., 1990, 26, 760-769.
3. Jeon J.-W., Yoon S., Choi, H.W., [et. al], Appl. Sci., 2018, 8, 112.

НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛ КРАСИТЕЛЕЙ МЕТИЛЕНОВОГО ГОЛУБОГО И ИНДОЦИАНИНА ЗЕЛЕНОГО В ПРИСУТСТВИИ ПЛАЗМОННЫХ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА

Чевычелова Т.А., Звягин А.И., Кондратенко Т.С., Смирнов М.С., Овчинников
О.В.

Воронежский государственный университет, РФ, Воронеж
e-mail: t.chevychelova@rambler.ru

Плазмонные наночастицы (НЧ) могут влиять на нелинейно-оптический отклик молекул красителей через плазмон-экситонное взаимодействие (ПЭВ), изменяя вероятность оптических переходов и заселенность энергетических уровней [1]. Одновременно вместе с эффектами ПЭВ в системе краситель-наночастица могут проявляться процессы безызлучательного переноса энергии и фотопереноса носителей заряда. Для выяснения механизма формирования наблюдаемого нелинейно-оптического отклика органических красителей кроме основного метода Z-сканирования [2] использовали методы абсорбционной и люминесцентной спектроскопии, а также фемтосекундной спектроскопии наведенного поглощения.

Представлены результаты исследования методом Z-сканирования нелинейно-оптических свойств тиазинового красителя метиленового голубого (МВ) и цианинового – индоцианина зеленого (ICG) в присутствии коллоидных плазмонных core/shell-НЧ Au/SiO₂ средним размером ядра 15 нм и оболочки 10 нм и НСт Au/SiO₂ средним размером ядра 26х6 нм и оболочки 20 нм, соответственно, в поле 10 нс импульсов YAG:Nd³⁺ лазера (532 нм) с частотой повторения 1 Гц. Смеси с соотношением числа молекул красителя к числу НЧ [v(МВ)]:[v(НЧ)] равным 7.1×10^4 м.д. получали введением в водный раствор МВ ($2.5 \cdot 10^{-5}$ М) коллоидных НЧ Au/SiO₂ ($6.0 \cdot 10^{-9}$ М). Смеси ICG с НСт Au/SiO₂ получали путем внесения в этанольный раствор ICG ($1.0 \cdot 10^{-5}$ М), коллоидных НСт Au/SiO₂ ($6.0 \cdot 10^{-10}$ М) в соотношении [v(ICG)]:[v(НСт)] = $1 \cdot 10^5$ м.д.

Красители МВ и ICG демонстрируют Z-сканах обратно насыщенное поглощение (RSA) (рис.1). Наблюдалось усиление RSA красителей МВ и ICG в присутствии core/shell-НЧ Au/SiO₂ и НСт Au/SiO₂, соответственно (рис.1). Установлены коэффициенты нелинейного поглощения для МВ и ICG, а также растворов красителей в присутствии НЧ, составившие: $\beta_{\text{МВ}} = 0.90 \times 10^{-8}$ см ВТ⁻¹, $\beta_{\text{ICG}} = 9.00 \times 10^{-10}$ см ВТ⁻¹ и $\beta_{\text{МВ/Au/SiO}_2} = 2.05 \times 10^{-8}$ см ВТ⁻¹ и $\beta_{\text{ICG/Au/SiO}_2} = 6.00 \times 10^{-9}$ см ВТ⁻¹.

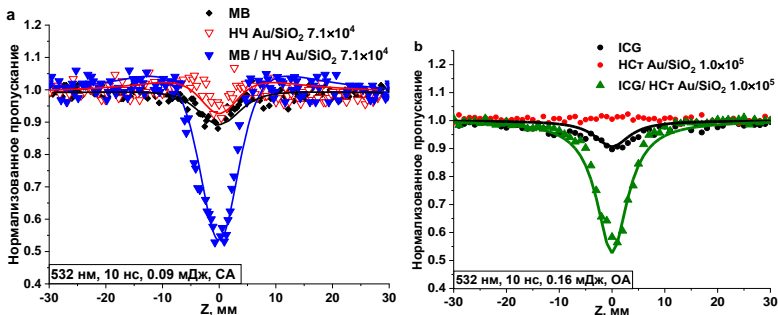


Рис. 1. Z-сканы растворов смесей MB / НЧ Au/SiO₂ (а), ICG / НСт Au/SiO₂ (б) и образцов сравнения

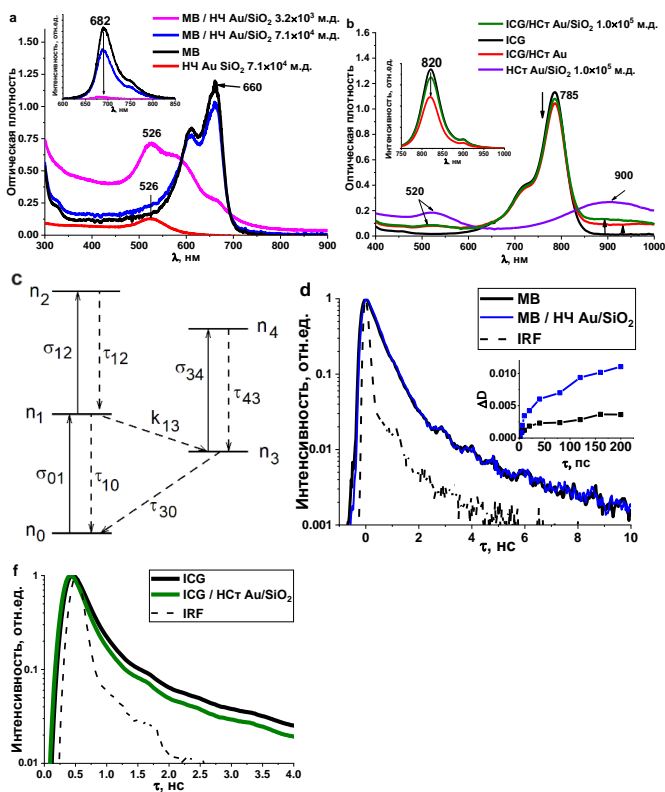


Рис. 2. Спектры поглощения и экстинкции света исследуемых образцов: MB / НЧ Au/SiO₂ (а), ICG / НСт Au/SiO₂ (б). Пятиуровневая схема переходов в молекулах красителей (с). Кинетика затухания люминесценции MB (d) и ICG (e)

Диэлектрическая оболочка SiO₂ core/shell-НЧ полностью блокирует процессы переноса заряда между плазмонными НЧ и молекулами красителей. Передача

энергии от красителей к НЧ маловероятна, так как отсутствует перекрытие спектра люминесценции МВ и спектра экстинкции НЧ Au/SiO₂ (рис. 2, а, врезка), а спектр люминесценции ICG перекрывается со спектром экстинкции НСг Au/SiO₂ лишь частично (рис. 2, b, врезка). Таким образом, основным процессом, определяющим нелинейно-оптический отклик, является ПЭВ, сопровождающееся изменением констант оптических переходов в молекулах МВ и ICG. В случае МВ процесс RSA, в пренебрежении вынужденными переходами, будет определяться переходами с уровня 0 и уровня 3 и, соответственно, их заселённостью в виду высокого выхода триплетов более 0.52 (рис. 2, с). При увеличении интенсивности излучения вблизи поверхности НЧ происходит изменение заселённости состояний по сложному закону: заселённость основного состояния (n_0) уменьшается, а заселённость триплетного уровня (n_3) увеличивается. Механизм RSA в ICG может реализовываться как при двухквантовых переходах с участием второго возбужденного состояния в виду значительного сечения поглощения σ_{12} на длине волны 532 нм, так и триплетного состояния с учетом выхода триплетов 0.16 [3].

Идентичность кривых затухания люминесценции чистых красителей и смесей красителей с НЧ позволяет заключить, что время жизни состояния 1 не изменяется в присутствии НЧ (рис. 2, d, f). Поскольку время жизни возбужденного состояния 1 определяется распадом по двум каналам, описываемых константами $1/\tau_{10}$ и k_{13} , то можно заключить, что эти константы также не изменяются. Таким образом остаётся единственная величина, изменение которой будет определять эффективность RSA в МВ – сечение триплет-триплетного поглощения σ_{34} , а в случае ICG – сечение синглет-синглетного σ_{12} и триплет-триплетного поглощения σ_{34} . Это предположение подтверждается увеличением амплитуды сигнала наведенного поглощения для смеси МВ / НЧ Au/SiO₂ на длине волны 532 нм в 2.5 раза по сравнению с чистым раствором МВ (рис. 2, d, врезка). Изменение заселённости энергетических уровней из-за увеличения сечений поглощения соответствует режиму слабой связи ПЭВ (эффект Парселла).

Работа выполнена при поддержке государственного задания вузам (№FZGU-2023- 0007).

1. Tam F., Goodrich G.P., Johnson B.R., Halas N.J. Nano Lett., 2007, 7, 1496-501.
2. Sheik-Bahae M., Said A., Wei T. [et. al], IEEE J. Quantum Electron., 1990, 26, 760-769.
3. De Boni L., Rezende D.C.J., Mendonca C.R. J. Photoch. Photobio. A., 2007, 190, 41–44.

ОЦЕНКА ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ СПЕЦИФИЧНОСТИ АЗОЛОТРИАЗИНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ К БИОМАКРОМОЛЕКУЛАМ

Черных Ю.А., Плешкова М.Н., Вандышев Д.Ю. Антипов С.С.

*ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, 394018, Университетская площадь, 1
e-mail: che.julia1520@mail.ru, тел.: 8 (900) 944-03-74*

Флуоресцентные красители - обширный класс органических соединений, широко используемых в биофизических исследованиях для аналитических целей. Особенно актуально использование таких красителей в исследовании веществ или материалов, не обладающих способностью флуоресцировать, или в случаях, когда эта способность выражена слабо. Благодаря использованию искусственных флуорофоров в флуоресцентной микроскопии или спектроскопии возможно оценить изменения конформации биомакромолекул, а также исследовать молекулярные механизмы возникновения и развития патологических процессов, действие на организм биологически активных веществ и лекарственных препаратов. Флуоресцентные красители широко используются в исследованиях для обнаружения бактерий и патогенных микроорганизмов. В связи с этим, важно изучать специфичность взаимодействия новых флуоресцентных красителей с различными белками, чтобы выяснить, могут ли они быть полезны для этих целей.

В ходе нашего исследования были зарегистрированы спектры поглощения флуоресцентных красителей в диапазоне длин волн от 190 до 900 нм. Максимумы для чистых красителей 8, 14, 15 локализованы в области 250 нм, 320 нм, 350 нм, для красителей со 2 по 5 в области 260 нм и 410 нм, для 11 и 12 в области 310 нм, 370 нм, 470 нм и 500 нм, для 9 красителя в области 350 нм, 460 нм и 510 нм. Для красителя 1 максимумы локализованы в области 250 нм и 510 нм, для 13 в области 240 нм, 300 нм и 490 нм, для 16 в области 210 нм, 240 нм и 560 нм. Максимумы для 6 красителя локализованы в области 280 нм, 380 нм и 420 нм, для 7 в области 305 нм, 360 нм и 405 нм, для красителя 10 в области 260 нм и 360 нм. Присутствие лизоцима приводило к унификации спектров для всех красителей, максимумы были зарегистрированы в области 225 нм и 280 нм. Затем был проведён поиск максимумов испускания для флуоресцентных красителей. Для всех был зарегистрирован максимум при длине волны в области 327 нм. При этом красители 8 и 13 имели дополнительные максимумы в области 480 нм, красители 10, 14 и 15 в области 490 нм, краситель 2 в области 510 нм, красители 4 и 7 в области 515 нм, красители 5 и 6 в области 530 нм, краситель 3 в области 537 нм. Далее были зарегистрированы спектры испускания для флуоресцентных красителей в присутствии лизоцима, который привёл к смещению максимумов флуоресценции в область 340 нм для красителей с 1 по 8, у 8 красителя присутствует дополнительный максимум в области 440 нм. Для красителей с 9 по 16 сохранился максимум при 327 нм, но их интенсивность значительно увеличилась. Зарегистрированные спектры флуоресценции в присутствии лизоцима свидетельствуют о том, что для красителей 1-8 и 9-16 характерны различные максимумы.

ВОЛЬТ-АМПЕРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТОНКИХ ПЛЁНОК КТ PbS В ПРИСУТСТВИИ ЙОДИДА КАЛИЯ ДЛЯ ФОТОДЕТЕКТОРОВ

Чирков К.С., Смирнов М.С., Овчинников О.В., Гревцева И.Г.

ФГБОУ ВО «ВГУ», Воронеж, Россия

e-mail: kirill200598@mail.ru, тел.: 8 (473) 2208780

Квантовые точки (КТ) являются перспективными материалами благодаря возможности тонкой настройки их спектральных свойств и области фотоэлектрической чувствительности без изменения «химии» соединения только за счёт квантово-размерного эффекта. Благодаря своим уникальным свойствам КТ являются перспективным материалом для создания различных оптоэлектронных устройств, в частности, активные исследования ведутся в направлении создания фотодетекторов [1-3].

Практически важным является фотодетектирование в ближней ИК области. Благодаря большому борновскому радиусу экситона (20 нм) и малой ширине запрещённой зоны (0.41 эВ) [4], размерный эффект в КТ сульфида свинца (PbS) позволяет настраивать область их спектральной чувствительности от 0.6 до 2.5 мкм, что делает их перспективным материалом для создания ИК фотодетекторов.

В работе проведено исследование электрофизических свойств конденсатов квантовых точек PbS, пассивированных тиогликолевой кислотой и дополнительно обработанных раствором йодида калия (KI). Образцы синтезировали в рамках методов коллоидной химии. Поверхность КТ модифицировали внесением KI в раствор КТ. Результаты рентгеновской дифракции показывают, что атомы йода не встраиваются в объём КТ и не изменяют кристаллическую структуру PbS.

Для исследования влияния йода на электрические свойства КТ, были приготовлены плёнки исходных КТ (PbS/TGA), а также КТ, обработанные раствором KI (PbS/TGA(KI)). Формирование тонких плёнок осуществляли поливом водных растворов на оптически прозрачные проводящие подложки оксида индия-олова (ITO). Вольт-амперные характеристики (ВАХ) КТ исследовались в структуре ITO – плёнка КТ – Al электрод. Проводящие свойства плёнок КТ исследовались в режиме постоянного тока при комнатной температуре. Полученные ВАХ имеют несимметричную форму относительно нулевого напряжения (рис. 1), т.е. проводимость структуры преимущественно определялась барьером Шоттки, возникающим на границе плёнка КТ – Al электрод. При этом для образца PbS/TGA(KI) характерно заметно большее значение тока при том же напряжении, что и для образца PbS/TGA. При напряжении 1 В, ток протекающий через образец PbS/TGA составляет 0.03 мкА, в то время как образец PbS/TGA(KI) при том же напряжении демонстрирует значение тока в 35 мкА.

Полученные ВАХ были проанализированы с использованием уравнения Шокли [5]:

$$I = I_0 (\exp(eU/nkT) - 1),$$

где I_0 – обратный ток насыщения, e – заряд электрона, k – постоянная Больцмана, T – температура, при которой проводится измерение, n – параметр идеальности диода. Рассчитанные таким образом параметры идеальности для образцов составили 15 для

PbS/TGA и 4 для PbS/TGA(KI). Также был определён обратный ток насыщения – 1.6 нА для образца PbS/TGA и 3.2 нА для PbS/TGA(KI).

Массивный PbS является полупроводником *n*-типа, однако тип проводимости КТ PbS зависит от степени окисления поверхности. Плохая пассивация приводит к окислению поверхности и изменению типа проводимости на *p*-тип, однако обработка КТ йодом позволяет защитить поверхность КТ от воздействия кислорода. Из полученных данных можно сделать вывод, что для наших плёнок КТ характерен *p*-тип проводимости. Улучшение токопроводимости плёнки PbS/TGA(KI) (рис. 1(б)) в сравнении с плёнкой PbS/TGA (рис. 1(а)) может быть связано с тем, что йод, адсорбируясь на поверхности КТ, занимает вакантные места, препятствуя окислению поверхности, что как следствие приводит к уменьшению величины барьера между КТ и Al электродом.

Полученные данные свидетельствуют о том, что обработка поверхности КТ PbS йодом позволяет улучшить электрические свойства тонких плёнок КТ. Улучшение электрических свойств может происходить за счёт улучшения пассивации атомами йода, занимающими вакантные места на поверхности КТ.

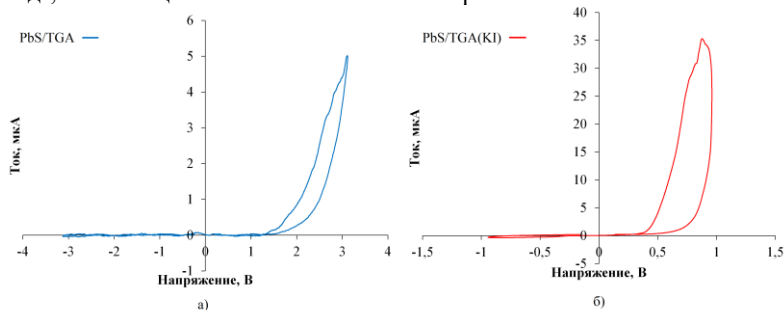


Рис. 1. ВАХ плёнок КТ PbS(а) и КТ PbS(KI) (б)

Работа поддержана грантом РФФ № 22-12-00232

1. Xu G., Zeng S., Swihat M., Yong K.T., Prasad P., Chem. Rev., 2016, 116, 12234-12327.
2. Zebibula A., Alifu N., Xial L., Sun C., Yu X., Xue D., Liu L., Li G., Qian J., Adv. Funct. Mater., 2018, 28, 1703451.
3. Yin X., Zhang C., Guo Y., Yang Y., Xing Y., Que W., J. Mater. Chem. C., 2021, 9, 417-438.
4. Scanlon W.W., J. of Phys. And Chem. of Solids, 1959, 8, 423-428.
5. Dhifaoui H., Aloui W., Bouaziz A., Mat. Res. Exp., 2020, 7, 045101.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МАССОВОЙ ПЛОТНОСТИ ИОННО-МОДИФИЦИРОВАННЫХ ТОНКИХ ПЛЕНОК МЕТОДОМ РФЭС

Чукавин А.И., Картапова Т.С., Гильмутдинов Ф.З.

УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, Россия
e-mail: chukavin@udman.ru, тел.: 8 (3412)43-18-94

Сателлитная структура, сопровождающая рентгенофотоэлектронный (РФЭ) пик C1s, как было показано, например, в работе [1], несет в себе важную информацию о материале. В частности, было установлено, что пик плазмонных потерь $\pi + \sigma$ графита на расстоянии 27 эВ от основного пика C1s позволяет определить массовую плотность графита. Учитывая связь энергии плазмона и массовой плотности вещества, было определено, что плотность фуллерена составляет 2,03 г/см³, что существенно отличалось от значений, ранее полученных рентгеноструктурными методами [2]. Исследованию спектров потерь энергии электронов посвящено значительное количество работ, в том числе [3-5]. В ряде работ были получены значения энергий пиков плазмонных потерь E_p в спектрах углеродных материалов, определено положение пиков потерь для различных форм углерода (графит, алмаз, аморфный углерод, стеклоуглерод) [6,7]. При этом часть экспериментальных данных была получена методами EELS (Electron energy loss spectroscopy) при облучении поверхности моноэнергетичным пучком электронов.

В настоящей работе с применением методики анализа спектров потерь энергии фотоэлектронов совместно с анализом спектров комбинационного рассеяния света проводится качественная оценка массовой плотности и степени разупорядочения тонких углеродных пленок (30±4 нм), полученных на поверхности армко-железа методом магнетронного распыления углеродной мишени в среде рабочего газа Ar. Также проводится сравнение результатов, полученных для аналогичных углеродных пленок, но подвергавшихся имплантации ионов Ag⁺ и N⁺ с энергией E = 30 кэВ. Показано, что сателлитная структура C1s спектров при совместном анализе с РФЭС основного уровня C1s подтверждает формирование разупорядоченной структуры углеродной пленки и позволяет определять массовую плотность тонких углеродных пленок. Анализ C1s спектров и спектров потерь $\pi + \sigma$ от C1s пика позволяет оценить разупорядоченность, однородность и массовую плотность углеродной тонкой пленки.

Исследования выполнены с использованием оборудования ЦКП «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ №1022040600207-2, при поддержке Минобрнауки России (договор № 075-15-2021-1351) в части развития методологии рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

1. Шульга Ю.М., Моравский А.П., Лобач А.С., Рубцов В.И. Спектр потерь энергии электронов фуллерена C₆₀, сопровождающий фотоэлектронный пик C1s// Письма в ЖЭТФ. 1992. Т.55. Вып.2. С. 137-140.
2. Kratshmer W., Lamb L.D., Fostiropoulos K., Huffman D.R. Solid C₆₀: a new form of carbon// Nature. 1990. V. 347. P. 354-358.
3. Байтингер Е.М., Бржезинская М.М., Шнитов В.В. Плазмоны в графите// Химическая физика и мезоскопия. 2002. Т. 4. № 2. С. 178-187.
4. Байтингер Е.М., Бржезинская М.М., Шнитов В.В. Спектроскопия характеристических потерь энергии электронами углеродных нанотрубок//Химическая физика и мезоскопия. 2003. Т. 5. № 1. С. 5-19.
5. Brzhezinskaya M.M., Vinogradov A.S., Krestinin A.V., Zvereva G.I., Kharitonov A.P. Electronic structure of fluorinated single-walled carbon nanotubes studied by X-Ray absorption and photoelectron spectroscopy// Fullerenes Nanotubes and Carbon Nanostructures. 2010. V. 18. P. 590-594.
6. Hoffman S. Auger and X-Ray Photoelectron Spectroscopy in Materials Science//Springer Berlin Heidelberg. 2012. P. 528. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-27381-0>
7. Афанасьев В.П., Попов А.И., Баринов А.Д., Бодиско Ю.Н., Бочаров Г.С., Грязев А.С., Елецкий А.В., Капля И.Н. Мирошникова О.Ю. Ридзель П.С. Анализ углеродных и углеродосодержащих материалов методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии// Микроэлектроника. 2020. Т.49. № 1. С. 50-57.

НАНОМАТЕРИАЛЫ ДЛЯ МЕТАЛЛОКСИДНЫХ ГАЗОВЫХ СЕНСОРОВ

Шапошник А.В.¹, Звягин А. А.¹, Арефьева О.А.², Рябцев С.В.²

¹ Воронежский Государственный Аграрный университет, ул. Мичурина, 1, Воронеж, РФ

² Воронежский Государственный университет, Университетская пл., 1, Воронеж, РФ

Для определения токсичных и горючих газов в труднодоступных местах широко используются анализаторы на основе полупроводниковых сенсоров. Повышение чувствительности, селективности и стабильности анализа связано с синтезом новых металлоксидных наноматериалов.

Наибольшее распространение получил «золь-гель» синтез, связанный с химическим превращением растворимых солей в нерастворимые гидроксиды в виде коллоидных частиц. После центрифугирования и высушивания такие соединения, как, например, оловянная кислота, вольфрамовая кислота, гидроксид цинка подвергаются термической обработке, при этом наночастицы дегидратируются и превращаются в наночастицы оксидов – SnO₂, WO₃, ZnO и так далее. После термической обработки наночастицы оксидов смешиваются с жидкостью, наносятся на специальную диэлектрическую подложку в виде пасты и отжигаются. В результате этого процесса наночастицы, ранее составлявшие золь, превращаются в хрупкий гель, обладающий газочувствительными свойствами. Полученные газочувствительные материалы считаются толстослойными.

Характеризация металлоксидных нанопорошков проводится просвечивающей электронной микроскопией, рентгеновским фазовым анализом, а также фотоэлектронной спектроскопией и методом XANES. Удельная адсорбция определяется методом BET. Совокупность этих методов показала, что металлоксидные наночастицы, имеющие размер 5-15 нм, имеют составную структуру – состоят из ядра и оболочки. Характеризация полученного хрупкого геля проводится растровой электронной микроскопией и рентгеновским фазовым анализом.

В основе гидротермального синтеза - кристаллизация наночастиц из водных растворов при температуре выше 100 °С и повышенном давлении. Гидротермальный синтез позволяет получить материалы различной морфологии, например, нанонити. Синтез металлоксидных наночастиц может также проводиться методами CVD, например, магнетронным распылением. Металлическая мишень в этом случае превращается в наночастицы, оседающие из газовой фазы на подложку в виде тонкого слоя. В дальнейшем эти металлические частицы окисляются при нагревании. Характеризация проводится методами электронной микроскопии и рентгеновским фазовым анализом. В газотранспортном синтезе используется твердофазный источник, способный при определенных условиях контролируемо испаряться и осажаться на поверхности. Рост кристаллов в этом случае может приводить к образованию монокристаллических нанонитей.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 23-23-00329).

АТОМНОЕ СТРОЕНИЕ СМЕШАННО-ЛИГАНДНЫХ КОМПЛЕКСОВ НИКЕЛЯ(II) НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОИЛГИДРАЗОНА 2-(N-ТОЗИЛАМИНБЕНЗАЛЬДЕГИДА) И 1-АЛКИЛ-2-АМИНОБЕНЗИМИДАЗОЛОВ

А.А. Ширяева¹, В.Г. Власенко¹, Б.В. Чальцев², А.С. Бурлов², Ю.В. Кошценко², В.А. Лазаренко³.

¹Южный федеральный университет, Научно-исследовательский институт физики, Ростов-на-Дону, Россия

²Южный федеральный университет, Научно-исследовательский институт физической и органической химии, Ростов-на-Дону, Россия

³Национальный Исследовательский Центр "Курчатовский Институт", Москва, Россия

e-mail: Anastasia.shiryeva00@mail.ru, тел.: 8 (951) 5284290

Гидразоны ароматических альдегидов – широкий класс лигандов, который представляет устойчивый научный и практический интерес. Эти органические лиганды, в зависимости от конкурентного связывания их донорных центров с атомом металла, позволяют получать комплексы с самым разнообразным строением и составом координационного полиэдра (низкосимметричные моноядерные, полиядерные, полимерные структуры), что обуславливает многообразие физико-химических свойств полученных соединений [1]. Многие из гидразонов ароматических альдегидов обладают ярко выраженной биологической активностью [2]. Также, ряд комплексов гидразонов редкоземельных элементов обладают фотолуминесцентными свойствами и использовались в качестве эмиссионного слоя в OLED [3]. Несмотря на успехи в области синтеза, изучения строения и свойств комплексов металлов ацилгидразонов и их аналогов, в литературе, также, недостаточно освещен вопрос аддуктообразования таких комплексов.

Целью данной работы является изучение атомной структуры комплексов никеля(II) с 2-(N-тозиламино)бензальдегид бензоилгидразоном и их аддуктов с N-донорными гетероциклическими основаниями.

Элементный анализ на С, Н, N выполняли на приборе Carlo Erba Instruments TCM 480. Анализ на металл проведен весовым методом. Температуру плавления измеряли на столике Кюфлера. Спектры ЯМР ¹H регистрировали на приборе Varian Unity-300 (300 МГц) в ДМСО-d₆. Химические сдвиги ядер ¹H приведены относительно остаточных сигналов дейтерорастворителя. ИК-спектры образцов регистрировали на приборе Varian 3100-FTIR Excalibur в области 4000–400 см⁻¹ методом нарушенного полного внутреннего отражения.

Рентгеноструктурные исследования монокристаллов NiLL^{1,2} были проведены на синхротронной станции “Белок/XSA” НИЦ “Курчатовский институт” [4]. Дифракционные данные были получены в прямой геометрии ($\theta = 0^\circ$) и в комбинации прямой и повернутой геометрии ($\theta = 0^\circ$ для первого набор данных и $\theta = 31^\circ$ для второго набора данных) с использованием 2D позиционно-чувствительного детектора Rayonix SX165 CCD ($\lambda = 0.80246 \text{ \AA}$, T = 100 K, ϕ -сканирование с шагом 1.0°). Данные были проиндексированы и интегрированы с помощью программных

пакетов XDS и XSCALE [5]. Кристаллографические структуры были решены прямыми методами (внутренняя фазировка) с помощью SHELXT [6]. Структурные модели были определены с помощью программы Olex2 [7] и уточнены SHELXL [6] с использованием полноматричного метода наименьших квадратов F^2 с анизотропными смещениями для всех неводородных атомов.

Синтезирован новый бензоилгидразон 2-(N-тозиламино)бензальдегида и получены мооядерные аддукты никеля(II) на его основе с дополнительным лигандом в виде 1-пропил-2-аминобензимидазола или 1-гексил-2-аминобензимидазола.

Для полученных аддуктов производных 2-аминобензимидазола $\text{NiLL}^{1,2}$ были получены монокристаллы, пригодные для рентгеноструктурных исследований. Молекулярное строение аддуктов $\text{NiLL}^{1,2}$ вместе со схемой нумерации атомов показано на рис. 1.

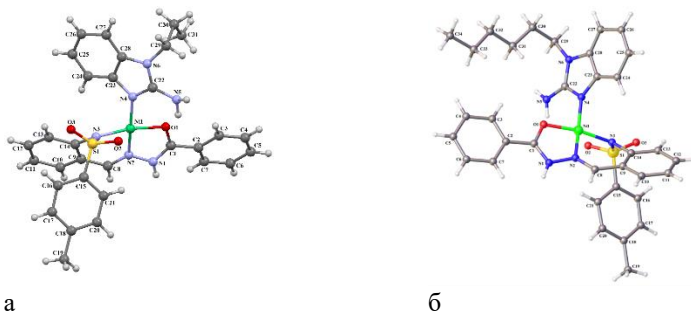


Рис. 1. Молярная структура NiLL^1 (а), NiLL^2 (б) с метками всех атомов, отличных от Н. Тепловые эллипсоиды показаны с вероятностью 50%.

Все аддукты $\text{NiLL}^{1,2}$ кристаллизуются в триклинной пространственной группе $P\bar{1}$. Объемы элементарных ячеек NiLL^2 на 12% выше, чем таковые для NiLL^1 , что обусловлено, по-видимому, увеличением длины цепи алкильного заместителя в дополнительном гетероциклическом монодентатном лиганде L^2 (гексил) по сравнению с L^1 (пропил). Во всех молекулах аддуктов NiLL^2 один тридентатный H_2L координирован к иону Ni(II) через депротонированный атом азота тозиламинового фрагмента N3, депротонированный атом азота бензальдегидного фрагмента N2 и атом кислорода гидразонового фрагмента O1, образуя соответственно шести- и пятичленные хелатные кольца. Четвертая координационная связь образуются за счет взаимодействия с атомом азота N4 1-пропил-2-аминобензимидазола или 1-гексил-2-аминобензимидазола, соответственно. Таким образом, ионы никеля(II) в $\text{NiLL}^{1,2}$ находятся в искаженном плоско-квадратном окружении. Все мооядерные аддукты никеля(II) содержат координированный 2-(N-тозиламино)бензальдегид бензоилгидразон в кето-форме.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FENW_2023-0014).

1. Burlov A.S., Vlasenko V.G., Chal'tsev B.V., et al., *Russ. J. Coord. Chem.*, 2021, 47 (7), P. 439–472.
2. Rollas S., Küçükgülzel S.G., *Molecule*, 2007, 12(8), P. 1910–1939.
3. Kovalenko A.D., Bushmarinov I.S., Burlov A.S., et al., *Dalton Trans.*, 2018, 47, P. 4524.
4. Svetogorov R.D., Dorovatovskii P.V., Lazarenko V.A., *Crystal Res. Technol*, 2020, 55(5), P. 1900184.
5. Kabsch W., *Acta Crystallogr. Sect. D: Bio. Crystallogr.*, 2010, 66(2), P. 125-132.
6. Sheldrick G.M., *Acta Crystallogr. Sect. A: Found and Advance*, 2015, 71(1), P. 3-8.
7. Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J., *J. Appl. Crystallogr.*, 2009, 41, P. 339-341.

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ РЕЗИСТИВНЫХ ПОКРЫТИЙ ТВЕРДОГО РАСТВОРА-В СИСТЕМЕ Cu-N НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Шманай Е.Е.¹, Зур И.А.¹

¹ *Институт ядерных проблем БГУ, Минск, Республика Беларусь
e-mail: ouik9970@gmail.com, тел.: +375-(29)-728-9607*

В детекторах газового типа в настоящее время используется резистивное покрытие известное как **DLC** (Diamond Like Carbon). Именно это покрытие выступает в роли токоограничивающего резистора, которое не только отводит электронную лавину после умножения, но и предотвращает электрические пробой в газе. Сопротивление **DLC** покрытий изменяется в широком диапазоне – от единиц кОм до сотен ГОм в зависимости от метода получения [1]. Экспериментально доказано, что стабильность электрофизических характеристик тонких пленок **DLC** изменяется со временем, что является критическим фактором для работы детектора длительное время (до 5 лет). По этой причине актуальной задачей является поиск альтернативных покрытий, которые соответствуют требованиям долгосрочной эксплуатации в детекторе без деградации как характеристик покрытия, так и параметров самого детектора. Предлагается использовать соединения на основе нитридов простых металлов (например, медь (Cu), алюминий (Al)), так как именно эти металлы преимущественно используются в детекторе и не будут давать вклад в полученный сигнал со считывающей электроники.

Ранее выявлено [2], что значения электросопротивления, характерные для покрытий на основе нитрида меди (Cu_3N), могут варьироваться в диапазоне от сотен МОм до сотен ГОм посредством изменения концентрации азота (N_2) во время напыления. Подобная гибкость в изменении важнейшей функциональной характеристики покрытий на основе Cu_3N является определенным преимуществом перед покрытиями **DLC**.

В настоящей работе синтезирован набор образцов методом магнетронного распыления с изолированным подводом N_2 с изменением расхода N_2 от 3 до 10 л/ч. Фазовый состав использовался методом малоугловой рентгеновской дифракции (**РФА**) с использованием приставки для изучения тонких пленок (RIGAKU Ultima IV). Толщина покрытий оценивалась на поперечном сколе методом сканирующей электронной микроскопии (**СЭМ**) на микроскопе HITACHI S-4800 и составила 10 нм. Вольт-амперные характеристики (**ВАХ**) снимались на источнике-измерителе GSM7-20H10 в диапазоне от -5 до +5 В.

Рентгенограммы полученных покрытий представлены на рисунке 1 (а-в). Видно, что линии отражения на рентгенограммах соответствуют углам 2θ в диапазоне между характерными значениями для фазы Cu_3N ($2\theta = 41,03^\circ [2-7]$) и чистой меди ($2\theta = 43,3^\circ [8]$). Это дает основание для интерпретации наблюдаемых линий отражения, как формирование твердого раствора переменной стехиометрии на основе Cu_3N .

РФА показало, что при увеличении расхода азота N_2 от 3 до 10 л/ч центр тяжести рефлексов Cu-N (111) и Cu-N (200) (изменяется в сторону больших значений, что свидетельствует расширении кристаллической решетки (от 0,3698 до 0,3766 нм для

(111) и от 0,3725 до 0,3777 нм для (200)) и увеличении межплоскостного расстояния (от 0,2135 до 0,2174 нм для (111) и от 0,1862 до 0,1888 нм для (200)).

ВAX исследовались в продольной конфигурации и показали полностью линейные зависимости от -5 до +5 В. Абсолютное сопротивление R увеличивается от 720 Ом до 1,34 МОм при увеличении расхода N_2 ; удельное сопротивление увеличивается с $7,2 \cdot 10^{-6}$ до $1,3 \cdot 10^{-2}$ Ом·м.

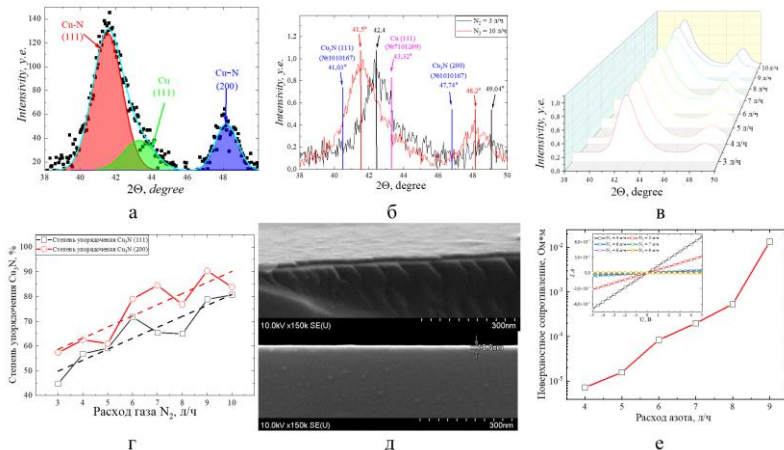


Рисунок 1 – (а) Рентгенограмма образца при расходе $N_2 = 10$ л/ч; (б) нормированные на максимум рентгенограммы при расходе $N_2 = 3$ и 10 л/ч; (в) нормированные на максимум рентгенограммы при разном расходе N_2 ; (г) зависимость степени упорядочения Cu_3N от расхода газа N_2 в тонких пленках Cu-N; (д) СЭМ изображения тонкой пленки Cu-N полученной на кремниевой пластине; (е) зависимость удельного электросопротивления от расхода N_2 в полулогарифмических координатах (на вставке – ВAX)

По результатам исследований установлено, что изменение давления N_2 во время синтеза пленок в системе Cu-N приводит к изменению стехиометрического состава покрытий, проявляющееся в изменении соотношения вкладов рефлекса (111) с 45 до 80%, и рефлекса (200) с 57 до 83%. Поверхностное электросопротивление изменяет практически на 3 порядка (увеличивается с $7,2 \cdot 10^{-6}$ до $1,3 \cdot 10^{-2}$ Ом·м) с увеличением расхода N_2 .

Результаты исследований указывают на возможность использования пленок на основе твердого раствора в системе Cu-N в качестве резистивных покрытий в газоразрядных детекторах. Варьирование электросопротивления тонких пленок Cu-N позволит изучить работу резистивного электрода в детекторах и механизм инжектирования электронной лавины.

[1] J. Robertson, Philosophical Magazine B **76**, 335 (1997).
 [2] D. Wang, N. Nakamine, and Y. Hayashi, Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films **16**, 2084 (1998).
 [3] G. H. Yue, P. X. Yan, and J. Wang, Journal of Crystal Growth **274**, 464 (2005).

- [4] H. T. Ali, Z. Tanveer, M. R. Javed, K. Mahmood, N. Amin, S. Ikram, A. Ali, M. R. H. Shah Gilani, M. A. Sajjad, and M. Yusuf, *Optik* **245**, 167666 (2021).
- [5] D. Dorrnian, L. Dejam, A. H. Sari, and A. Hojabri, *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* **50**, 20503 (2010).
- [6] F. Hadian, A. Rahmati, H. Movla, and M. Khaksar, *Vacuum* **86**, 1067 (2012).
- [7] K. Nowakowska-Langier, R. Chodun, R. Minikayev, S. Okrasa, G. W. Strzelecki, B. Wicher, and K. Zdunek, *Journal of Molecular Structure* **1165**, 79 (2018).
- [8] W. Chen, Z. Fan, and Z. Lai, *J. Mater. Chem. A* **1**, 13862 (2013).

МЕЖФАЗНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В $\text{MeO}_x/\text{MWNTs}$ ($\text{Me} - \text{Cu}, \text{Ni}$) ПО ДАННЫМ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ XANES СПЕКТРОВ.

Шматко В.А.¹, Ершов И.В.², Дмитриев В.О.¹, Яловега Г.Э.¹

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

² Донской государственный технический университет, Ростов-на-Дону,
Россия

e-mail: shmatko86@mail.ru

Использование различных видов материалов, таких как оксиды и материалы на основе нанолуглерода, в качестве сложных композитов создает непредсказуемые результаты из-за природы поверхностных взаимодействий между двумя различными материалами. В докладе будут представлены результаты теоретического анализа спектров рентгеновского поглощения XANES К-краев никеля и меди для композитов $\text{NiO}_x/\text{MWCNTs}$ и $\text{CuO}_x/\text{MWCNTs}$ [1].

Взаимодействие нанотрубки с нанокластерами NiO , $\text{Ni}(\text{OH})_2$, CuO и Cu_2O изучалось из первых принципов с использованием оригинальных моделей в рамках подхода суперячейки [2]. Самосогласованные расчеты были выполнены с использованием метода псевдопотенциала и плоских волн в рамках теории функционала плотности. Расчеты спектров Ni и Cu К-края XANES были выполнены с использованием метода конечной разности полного потенциала, реализованного в FDMNES [3]. Вклад различных позиций поглощающего атома Me в системе в результирующий спектр спектры композитов оценивался с использованием линейной комбинации (LCF) теоретических спектров, рассчитанных для трех неэквивалентных позиций поглощающего атома - на интерфейсе $\text{MeO}_x - \text{УНТ}$, внутри и на поверхности металл-оксидной пластины.

В $\text{NiO}_x/\text{MWCNTs}$ реализуется смешанный тип межфазного взаимодействия, при котором перенос заряда происходит через связи Ni-C и Ni-O-C . Наличие не только связей Ni-O-C , но и связей Ni-C может усилить контакт между NiO и MWCNTs , способствуя переносу электронов между NiO и MWCNTs . Для $\text{CuO}_x/\text{MWCNT}$ интерфейсное взаимодействие определяется ковалентной связью через связи Cu-O-C .

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-22-00459).

1. Yalovega G.E., Brzhezinskaya M., Dmitriev V.O., Shmatko V.A., Ershov I.V., Ulyankina A.A., Chernysheva D.V., Smirnova N.V. Interfacial interaction in $\text{MeO}_x/\text{MWNTs}$ ($\text{Me}-\text{Cu}, \text{Ni}$) nanostructures as efficient electrode materials for high-performance supercapacitors, *Nanomaterials*, 2024, 14, 11. С. 947 (20).

2. Giannozzi, P.; Andreussi, O.; Brumme, T.; Bunau, O.; Nardelli, M.B.; Calandra, M.; Car, R.; Cavazzoni, C. Ceresoli, D.; Cococcioni, M.; Colonna, N. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO, *J. Phys. Condens. Matter*, 2017, 29, 465901.

3. Bunău, O.; Joly, Y. Self-consistent aspects of x-ray absorption calculations, *J. Phys. Condens. Matter*. 2009, 21, 34550.

РАСШИФРОВКА ФОТОЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЫ МОНОКРИСТАЛЛА ГЕРМАНИЯ И ЕГО ОКСИДА С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЁТОВ

Шрамков Е.А., Андреев А.А., Чумаков Р.Г., Станкевич В.Г., Суханов Л.П.

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
e-mail: egor@shramkov.ru, тел.: 8 (903) 213-77-55

Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС) является универсальным и эффективным методом изучения строения твёрдого тела. Данный метод позволяет определить элементный состав, наличие химических связей, распределение плотности электронных состояний и т.д. [1-2]. Основные фотоэлектронные спектры для большинства типов соединений химических элементов хорошо известны и имеют, как экспериментальное, так и теоретическое подтверждение. Фотоэлектронный спектр (ФЭС), получаемый от различных составных образцов (образцы с оксидными плёнками, адсорбированными молекулами на поверхности и т.д.), имеет распределение плотности электронных состояний вблизи валентной зоны, сложное для интерпретации [3-5]. Частично это связано с наличием в комплексных образцах широкого спектра различных химических связей, что влечёт за собой смешивание пиков плотности электронных состояний, характерных для отдельных химических связей. В данной работе рассматривается метод расшифровки подобных «сложных» спектров вблизи валентной зоны за счёт проведения расчёта распределения электронной плотности для физического объёма (атомарная модель), наиболее полно характеризующего исследуемый образец, с помощью методов квантовой химии, в приближение линейной комбинации атомных орбиталей с использованием *double-zeta polarized* описания электронной группы. Оптимальный набор функций, описывающих отдельный электронный уровень для работы, определялся путём сравнения процессов расчёта при использовании различных наборов: *single-zeta polarized*, *double-zeta polarized*, *triple-zeta polarized*, *triple-zeta double-polarized*. Нахождение оптимального положения атомов в заданном физическом объёме кластера производилось с помощью итерационного метода численной оптимизации *BFGS* (*Broyden*, *Fletcher*, *Goldfarb*, *Shanno*) по силе, действующей на отдельный атом, с учётом пространственного распределения потенциала, получаемого из квантово-химического расчёта. Теоретический фотоэлектронный спектр получался за счёт учёта сечений взаимодействия фотонов с электронами различных состояний, последующее взаимодействие фотоэлектронов с электронами твёрдого тела учитывалось с помощью функции Ширле.

Объектами исследования стали монокристалл германия с ориентацией (111) с наличием естественного оксидного слоя GeO_2 на поверхности и полученный *in situ* путём лазерного прогрева очищенный монокристалл $Ge(111)$. На рисунках 1 и 2 серые сферы обозначают атомы Ge , а красные – O .

Рентгеновские фотоэлектронные спектры для расшифровки были получены на диагностической станции наноФЭС [6], расположенной на Курчатовском исследовательском синхротронном источнике. Расчёт производился при помощи

кода, написанного на языке Python с применением библиотек ASE и GPAW (окружение для атомарного моделирования и проекционный метод присоединённых волн в сеточной реализации), с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт» (<http://ckp.nrcki.ru/>).

Для монокристалла Ge(111) отклонение по плотности фотоэлектронов в характерных пиках составило не более 33,1% (наибольшее отклонение наблюдается для пика с энергией -7.71 эВ относительно уровня Ферми). Для GeO₂/Ge(111) наибольшее отклонение в характерном пике составило 35,3% (наибольшее отклонение наблюдается для пика с энергией -5.67 эВ относительно уровня Ферми).

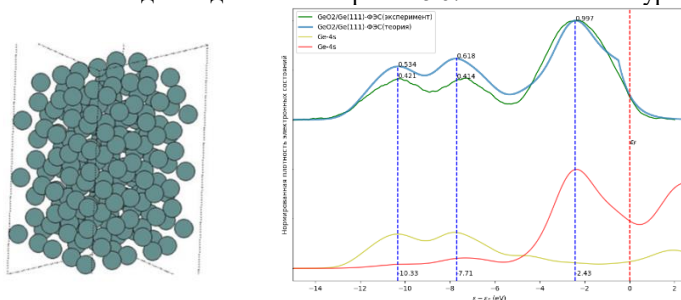


Рисунок 1 – Сравнение ФЭС Ge(111), полученных экспериментально и теоретически, внизу приведены локальные плотности электронных состояний

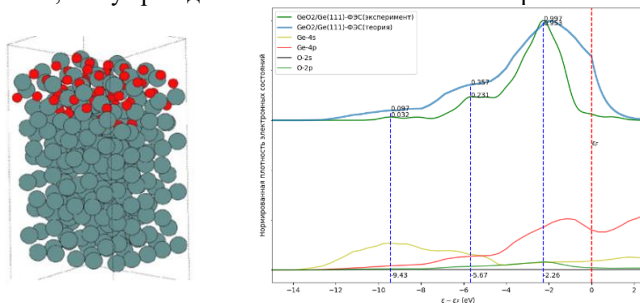


Рисунок 2 – Сравнение ФЭС GeO₂/Ge(111), полученных экспериментально и теоретически, внизу приведены локальные плотности электронных состояний

1. Электронная и ионная спектроскопия твердых тел / Ред. Фирменс Л. и др. М.: Мир, 1981. 468 с.

2. Fibelman P.J., Eastman D.E. // Phys. Rev. B. 1974. V. 10. № 12. P. 4932. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.10.4932>

3. J. Eidehagen et al., Journal of the electrochemical society. – 2023. DOI: 10.1149/1945-7111/acba4b

4. D. Zagidulin et al., Surf. Interface Anal. — 2013. — №45 — С. 814-822.

5. T. Hryniewicz, K. Rokosz, and H. R. Z. Sandim, Appl. Surf. Sci. – 2012 – P. 263.

6. А. М. Лебедев и др., Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2021. — № 10. — С. 44-49.

ПРИМЕНЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ МУРР ДЛЯ ВЫЯВЛЕНИЯ СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ ДНК-АПТАМЕРОВ.

Щугорева И.А.^{1,2}, Артюшенко П.В.^{1,2}, Морячков Р.В.^{1,3}, Заблуда В.Н.³, Томилини Ф.Н.^{3,4}, Кичкайло А.С.^{1,2}

¹ *ФГБНУ Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» 1, Красноярск, Россия*

² *Красноярский государственный медицинский университет имени профессора В. Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России 2, Красноярск, Россия*

³ *Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук 3, Красноярск, Россия*

⁴ *Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский федеральный университет» 4, Красноярск, Россия*

e-mail: shchugorevai@mail.ru, тел.: 8 (902) 9691154

Аптамеры, представляющие собой короткие последовательности нуклеотидов (ДНК или РНК), стали объектом особого внимания в различных областях науки и медицины благодаря своей способности высокоспецифически связываться с разнообразными мишенями, включая белки, малые молекулы и даже целые клетки. Их уникальные свойства делают аптамеры перспективными инструментами для использования в диагностических системах, терапевтических приложениях, биосенсорах и других биотехнологических разработках.

По мере расширения областей применения аптамеров, возрастает необходимость глубже понимать их пространственную структуру, поскольку именно трехмерная конфигурация определяет их способность распознавать и связываться с целевыми молекулами. Традиционными методами, такими как рентгеновская кристаллография и ядерно-магнитный резонанс (ЯМР), не всегда удается получить детальную информацию о структуре аптамеров, особенно в тех случаях, когда они функционируют в условиях, близких к физиологическим.

Малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР) предоставляет уникальную возможность дополнить традиционные методики и получить ценную информацию о форме и гибкости аптамеров в растворе. Этот метод позволяет собирать данные о структурных характеристиках биомакромолекул без необходимости кристаллизации, что особенно актуально для изучения динамических и структурно гибких объектов, таких как аптамеры.

Использование данных МУРР в комбинации с молекулярным моделированием позволяет воспроизвести атомную структуру аптамеров с высокой степенью точности. Молекулярное моделирование, включая методы молекулярной динамики, квантовой химии и докинга, позволяет не только смоделировать статическую структуру, но и исследовать динамические аспекты поведения аптамеров при взаимодействии с целевыми молекулами. Это дает возможность понять механизмы

связывания и адаптации, что, в свою очередь, способствует более обоснованному дизайну новых аптамеров с улучшенными характеристиками.

В работе были исследованы аптамеры к особо опасным заболеваниям, а именно раковым заболеваниям головного мозга [1] и легких [2], к вирусным заболеваниям, на примере SARS-CoV-2 [3], а также для лечения и профилактики тромбозов [4].

Работа выполнена при поддержке фонда РФФ (проект 21-73-20240).

1. Kichkailo A. S. et al., Molecular Therapy-Nucleic Acids, 2023, 32, 267-288.
2. Morozov D. et al., Molecular Therapy-Nucleic Acids, 2021, 25, 316-327.
3. Mironov V. et al., Chemistry–A European Journal, 2022, 28, e202104481.
4. Tomilin F. N. et al., Analytical and bioanalytical chemistry, 2019, 411, 6723-6732.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ РАСТРОВОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ ФОТОРЕЗИСТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ТЕХНОЛОГИИ ФОРМИРОВАНИЯ СВЧ КОПЛАНАРНЫХ ЛИНИЙ

Юртова Е.И., Бобров А.И., Николичев Д.Е.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, пр. Гагарина, 23, 603022 Нижний Новгород, Россия
e-mail: yurtova@unn.ru, тел.: 8 (920) 0255936*

Актуальной задачей в СВЧ технике является разработка микроэлектронных устройств, обеспечивающих эффективную передачу и обработку радиосигналов. При этом широко используются планарные волноводные структуры, в которых электромагнитные волны могут распространяться с минимальными потерями – они получили название копланарных линий. Последние представляют собой полосковые электроды, расположенные в одной плоскости на полупроводниковой или диэлектрической подложке. Для создания подобных структур применяется фотолитографический процесс, в котором при помощи специализированных фоторезистивных масок задаётся форма будущих электродов, формируемых посредством гальванического осаждения металлов. Основные этапы создания копланарной линии из золота с использованием УФ-отверждаемого материала представлены на рисунке 1.

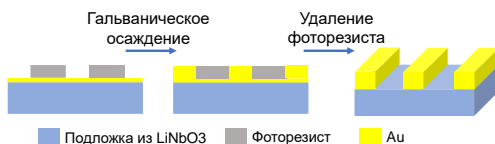


Рис.1. Схематичный вид технологии получения копланарной линии

Высокоэффективная работа радиочастотного волновода возможна только при соблюдении строгой геометрии его электродов. Для получения соответствующих структур параметры фоторезистивной маски должны отвечать следующим требованиям: гладкость, бездефектность и строгая вертикальность стенок при толщине слоя фоторезиста не менее 20 мкм. Достичь указанных требований возможно с использованием селективного плазмохимического травления (ПХТ), выполняемого через жёсткую маску алюминия.

В работе проведён анализ выборки УФ-отверждаемых полимерных материалов по критерию возможности формирования в них с использованием ПХТ вертикальных стенок, а также возможности полной очистки пробельных окон в кислород- и фторсодержащей плазме. Для контроля перечисленных параметров применялся метод растровой электронной микроскопии (РЭМ).

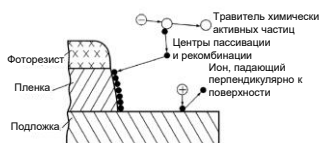


Рис.2. Иллюстрация механизма ПХТ [1]

На рисунке 2 приведена схема процесса взаимодействия свободных радикалов плазмы с поверхностью образца, подвергаемой травлению. На рисунке 3 представлены РЭМ-снимки фоторезистов, подвергшихся описанному воздействию. На изображениях видны очевидные различия в топографии

сформированных методом ПХТ фоторезистивных масок.

Позитивные фоторезисты ФП-2550 и ФП-202 в результате испытаний показали плохую воспроизводимость формирования полимерных масок после ПХТ: нарушена целостность и вертикальность стенок, а высота ступеньки не превышала 10 мкм. Кроме того, при использовании ФП-202 на дне пробельных окон образуется загрязнение.

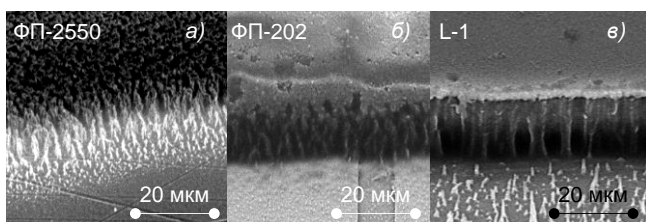


Рис.3. РЭМ-снимки фоторезистивной маски: ФП-2550 (а), ФП-202 (б), L-1 (в)

В случае использования акриловой смолы L-1 достигнуты удовлетворительные результаты: сформировались вертикальные стенки, характеризующиеся малой шероховатостью и средним значением толщины 18 мкм. При этом наблюдались загрязнения на дне пробельных окон маски.

Поскольку фоторезист L-1 продемонстрировал наилучшие характеристики стенок фоторезистивной маски, полученной после процесса ПХТ, то для него был проведен анализ элементного состава с целью определения возможных причин неполного удаления в плазме с образованием загрязнения. Диагностика была осуществлена с использованием растрового электронного микроскопа JEOL JSM-IT300LV с рентгеновским энергодисперсионным анализатором. Результаты элементного анализа по С, Н, N, S исходного образца смолы фоторезиста L-1 представлены в таблице 1.

Табл. 1. Концентрация элементов для образца с нанесенным фоторезистом L-1

| Элемент | С | Н | N | S |
|---------------------|----------|---------|-------|---------|
| Содержание, масс. % | 63,4±6,3 | 6,7±0,7 | < 0,3 | 3,4±0,3 |

Основу фоторезиста составляет полимер из соединений атомов С, О, N, Н. Также в цепь его макромолекулы могут быть включены атомы Р, S, F, Si [2]. Проведенный анализ показал, что в состав материала смолы L-1 не входят элементы, способные образовывать твердые нелетучие химические соединения с газами, используемыми

в процессе ПХТ. Таким образом, природа возникновения загрязнений на дне фоторезистивной маски с высокой вероятностью связана с образованием аллотропных форм углерода и требует дополнительного исследования.

В работе проанализировано 3 вида фоторезистивных материалов с точки зрения перспектив их применения в технологии создания копланарных линий, в которой используется плазмохимическое травление. Наилучшие характеристики полимерной маски были достигнуты на фоторезисте L-1. При этом его плазмохимическое травление приводит к образованию загрязнений на дне пробельных окон. При помощи метода рентгеновского микроанализа установлено, что образование указанных загрязнений не связано с химическим составом фоторезиста.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № FSWR-2022-0007.

1. Чаплыгин Ю.А. (ред.) "Основы технологии электронной компонентной базы: лабораторный практикум". Москва: МИЭТ, 2013- 176

2. Зуев В.В., Успенская М.В., Олехнович А.О. «Физика и химия полимеров», учебное пособие Санкт-Петербург. ИТМО, 2010 - 45

ИНТЕГРАЦИЯ БЕЛКА DPS С МАССИВОМ НАНОНИТЕЙ КРЕМНИЯ ПО ДАННЫМ МИКРОСКОПИЧЕСКИХ И РЕНТГЕНОСПЕКТРАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Паринова Е.В.¹, Беликов Е.А.¹, Сиваков В.², Чумаков Р.Г.⁴, Лебедев А.М.⁴, Какулия Ю.С.¹, Чувенкова О.А.¹, Антипов С.С.^{1,3,5}, Турищев С.Ю.¹

¹ Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

² Лейбниц институт фотонных технологий, Йена, Германия

³ Институт биофизики клетки РАН, Пущино, Россия

⁴ НИЦ "Курчатовский институт", Москва, Россия

⁵ Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград, Россия.

e-mail: bp4nth3r@mail.ru, тел.: 8 (473) 2406653

Массив кремниевых нанонитей (SiNWs) - это перспективная поверхность с контролируемыми физико-химическими свойствами, которая может быть модифицирована функциональными материалами в зависимости от задач применения. Один из перспективных вопросов связан с интеграцией между природными биоматериалами и полупроводниковыми наноструктурами. Белок Dps - DNA-bound Protein from Starved Cells (ДНК-связанный белок клеток в условиях голодания) - это молекула полый сферической формы, которая относится к группе бактериальных ферритинов. Эти молекулы показали способность образовывать ядро окисленного нанокластера железа с пространственным размером, ограниченным внутренней полостью молекулы. Сочетание Dps с массивом SiNWs может позволить создавать гибридные наноматериалы для наноэлектроники или спинтроники. В данном случае белок Dps играет роль источника и контейнера для наночастиц железа, с размером, ограниченным несколькими нанометрами, и идентичной формой, структурой и составом.

Рассмотрена возможность заполнения (интеграции) массивов SiNWs белком apo-Dps (молекулы, свободные от железа), а также информация о составе и структуре поверхностных/объемных частей полученных структур. В рамках этого исследования была изучена способность молекул проникать в пористую матрицу с применением ряда методов характеристики. Морфологические исследования полученных поверхностей планарно и в поперечном сечении проводились методом сканирующей электронной микроскопии высокого разрешения. Атомное и электронное строение поверхности и химический состав до и после иммобилизации Dps изучались с использованием поверхностно-чувствительных методов: синхротронной спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES) для оценки локального окружения атомов заданного сорта и лабораторной рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS) для определения физико-химического состояния развитой поверхности. Метод спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES - X-ray absorption near edge structure) дает информацию о распределении локальной парциальной плотности свободных электронных состояний вблизи дна зоны проводимости. Также метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии

(XPS - X-ray Photoelectron Spectroscopy) позволяет получать информацию о зарядовом состоянии атомов, составляющих изучаемый слой поверхности, например, массивов нитевидного кремния. Использовался функционал установки класса "мегасайенс" - синхротронного центра НИЦ "Курчатовский институт".

Показано успешное заполнение пространства внутри массива нитевидного кремния молекулярной культурой белка Dps. Установлено, что развитая поверхность нитевидного кремния не взаимодействует с белковым покрытием, оставаясь стабильной. Ферритин Dps полностью покрывает поверхность нитей кремния субмикронного сечения и может рассматриваться как средство адресной доставки нано- биогибридного материала для последующей функционализации развитой поверхности SiNWs. Полученные результаты могут сыграть ключевую роль в будущем формировании композитных наноструктур, содержащих малые наночастицы железа.

Работа выполнена при поддержке стипендии Президента Российской Федерации СП-189.2021.1 для молодых ученых и при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351.

ИЗУЧЕНИЕ ЛОКАЛЬНЫХ ТОКОВ И ЗАРЯДОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ И ПЛЕНКАХ МЕТОДОМ РЕНТГЕНОВСКОЙ ФОТОЭМИССИИ ПРИ ЛАЗЕРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Кузнецова Т.В.^{1,2}, Гребенников В.И.¹, Чумаков Р.Г.³

¹ИФМ УрО РАН, Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

³НИЦ Курчатовский институт, Москва, Россия

e-mail: kuznetsova@imp.uran.ru, тел.: +(919) 3788589

В работе проведен обзор современного состояния исследований метода изучения локальной проводимости полупроводниковых структур и тонких пленок с помощью рентгеновской фотоэмиссионной спектроскопии при включении / выключении лазерного воздействия (*Operando* XPS). Наведенная лазером фотопроводимость обеспечивает быструю релаксацию возбужденных состояний в полупроводниковых структурах, проявляющуюся в сдвиге энергии связи внутренних уровней. Данный экспериментальный метод имеет огромный потенциал и используется в нескольких зарубежных лабораториях, в которых осуществляется синтез и исследование полупроводниковых структур и материалов для солнечных батарей. Предлагается его реализация как на новых строящихся синхротронах РФ, так и на имеющихся лабораторных фотоэмиссионных спектрометрах.

Рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (XPS) является мощным методом спектроскопического определения локальных характеристик поверхности и обладает селективной чувствительностью к элементам. Фотоэлектронные спектры содержат информацию об электронных состояниях на различных атомах поверхности, а также информацию о локальных изменениях потенциала. В работах [1 – 3] было показано, что смещение потенциала при облучении лазером проявляется в XPS спектрах полупроводниковых поверхностей. Статические или квазистатические сдвиги XPS пиков могут быть связаны с эффектами фотоэдс и фотопроводимости [4, 5]. Энергии внутренних уровней химических элементов, измеряемые в XPS спектроскопии, могут служить чувствительными индикаторами локальных зарядов и процессов экранирования, а также их изменения при лазерном воздействии на поверхность.

В докладе сообщаются результаты исследования воздействия лазерного излучения на быстрые процессы отклика электронной системы при внезапном появлении положительных зарядов рентгеновской дырок в пленках и гетероструктурах.

Работа выполнена при поддержке проекта РНФ № 23-72-00067.

1. H. Cohen J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. 2010, 176, 24.
2. Hikmet Sezenand Sefik Suzer // J. Chem. Physics. 2011. 135, 141102
3. Nicole Johnson, et al. J. Vacuum Sci. & Technol. A. 2016. 34, 031201.
4. Pinar Aydogan Gokturk, et al. J. Vac. Sci. Technol. A, 2020; 38 (4): 040805.
5. Cho, Yun-Ju. et al. J. of Appl. Phys. vol. 136, (7), 075702, 2024.

Научное издание

**ВЫСОКОТОЧНАЯ ДИАГНОСТИКА
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ
МАТЕРИАЛОВ:
ЛАБОРАТОРНЫЕ И СИНХРОТРОННЫЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ**

*Сборник тезисов
IV Всероссийской молодежной конференции
(г. Воронеж, 30 сентября – 5 октября 2024 г.)*

Под общей редакцией
доктора физико-математических наук,
доцента *С. Ю. Турищева*

Издание публикуется в авторской редакции
и авторском наборе

Подписано в печать 23.09.2024. Формат 60×84/16.
Усл. печ. л. 14,07. Тираж 100 экз. Заказ 188.

ООО Издательско-полиграфический центр
«Научная книга»
394018, г. Воронеж, ул. Никитинская, 38, оф. 308
Тел. +7 (473) 200-81-02, 229-78-68
<http://www.n-kniga.ru>. E-mail: zakaz@n-kniga.ru

Отпечатано в типографии ООО ИПЦ «Научная книга».
394026, г. Воронеж, Московский пр-т, 11/5
Тел. +7 (473) 229-32-87
<http://www.n-kniga.ru>. E-mail: nautyp@yandex.ru