

Министерство просвещения Российской Федерации
Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена



ДИЭЛЕКТРИКИ-2024
САНКТ-ПЕТЕРБУРГ

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**XVI МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ФИЗИКЕ
ДИЭЛЕКТРИКОВ «ДИЭЛЕКТРИКИ-2024»**

2–4 октября 2024 г.

Санкт-Петербург

Издательство РГПУ им. А. И. Герцена

2024

Организационный комитет



Колобов Александр Владимирович

профессор, Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена (Санкт-Петербург).



Темнов Дмитрий Эдуардович

доцент, Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена (Санкт-Петербург).



Кононов Алексей Андреевич

доцент, Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена (Санкт-Петербург).



Волгина Елена Алексеевна

ассистент, Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена (Санкт-Петербург).

Члены организационного комитета

1. **Сударь Н. Т.**, профессор, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (СПбПУ) (Санкт-Петербург).
2. **Демидов Е. В.**, начальник управления научных исследований, Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена (Санкт-Петербург).
3. **Анисимова Н. И.**, доцент, Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена (Санкт-Петербург).
4. **Гулякова А. А.**, доцент, Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена (Санкт-Петербург).
5. **Гольдаде В.**, профессор, Гомельский государственный университет имени Ф. Скорины (Беларусь).
6. **Рычков Д. А.**, профессор, Деггендорфская высшая техническая школа (Германия).
7. **Фанг Пенг**, профессор, Шэньчжэньский институт передовых технологий Китайской академии наук (Китай).

Программный комитет



Бордовский Геннадий Алексеевич

Заслуженный деятель науки РФ, академик РАО, профессор, Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена (Санкт-Петербург).



Колобов Александр Владимирович

профессор, Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена (Санкт-Петербург).

Члены программного комитета

1. **Кастро Р. А.**, профессор, Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена (Санкт-Петербург).
2. **Борисова М. Э.**, профессор, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (СПбПУ) (Санкт-Петербург).
3. **Барабан А. П.** профессор, Санкт-Петербургский государственный университет (Санкт-Петербург).
4. **Теруков Е. И.**, профессор, Физико-технический институт имени А. Ф. Иоффе (Санкт-Петербург).
5. **Марченко А. В.**, профессор, Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена (Санкт-Петербург).
6. **Умаров А. В.**, профессор, Ташкентский университет прикладных наук (Узбекистан).
7. **Иванов В. К.**, профессор, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (СПбПУ) (Санкт-Петербург).
8. **Цобкалло Е. С.**, профессор, Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна (Санкт-Петербург).

9. **Немов С. А.**, профессор, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого (СПбПУ) (Санкт-Петербург).
10. **Галиханов М. Ф.**, профессор, Казанский государственный технологический университет (Казань).
11. **Приходько О. Ю.**, профессор, Казахский национальный университет им. Аль-Фараби (Казахстан).
12. **Бедельбаева Г. Е.**, доцент, Казахский национальный исследовательский технический университет имени К. И. Сатпаева (Казахстан).
13. **Альтафим Р. А. П.**, профессор, Федеральный университет Параибы (Бразилия).
14. **Гриценко В. А.**, профессор, Институт Физики Полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН (Новосибирск).

ПЛЕНАРНЫЕ ДОКЛАДЫ

МЕХАНИЗМЫ ТРАНСПОРТА ЗАРЯДА В ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ

Гриценко В. А.¹

1) *Институт физики полупроводников СО РАН, Новосибирск*

Целью обзора является рассмотрение и анализ механизмов транспорта заряда в диэлектрических пленках.

Эффект Френкеля. В настоящее время общепризнанным в мире является представление о том, что транспорт заряда в диэлектрических пленках лимитируется эффектом Френкеля-понижением кулоновского потенциала изолированной заряженной ловушки. Эффект Френкеля проявляется для изолированной заряженной ловушки при низкой ($\sim 10^{18}$ см⁻³) концентрации ловушек.

Модель Хилла-Адачи. Эта модель имеет место при высокой концентрации заряженных ловушек, когда имеет место понижение барьера за счет перекрытия кулоновских потенциалов соседних ловушек.

Эффект Френкеля и модель Хилла-Адачи, при сравнении с экспериментом, предполагают аномально малую (10^6 - 10^{10} сек⁻¹) величину частотного фактора. Теоретическое значение частотного фактора $\nu = W/h \approx 10^{14}$ сек⁻¹. Эти модели неприменимы для описания транспорта заряда в диэлектрических пленках.

Многофононная ионизация изолированной отрицательно заряженной изолированной ловушки, модель Макрама-Ланну [1]. Вероятность ионизации дается выражением

$$P = \sum \exp \left\{ \frac{nW_{ph}}{2kT} - \frac{W_{opt} - W_T}{W_{ph}} \coth \frac{W_{ph}}{2kT} \right\} I_n \left(\frac{W_{opt} - W_T}{W_{ph} \sinh(W_{ph}/2kT)} \right) P_i(W_T + nW_{ph})$$

где I_n – модифицированная функция Бесселя, $P_i(W)$ – вероятность туннелирования через треугольный барьер высотой W , W_T – термическая энергия ионизации ловушки, W_{opt} – оптическая энергия ионизации ловушки, W_{ph} – энергия фонона. Эта модель описывает проводимость Si₃N₄, Al₂O₃, BN.

Фонон-облегченное туннелирование между ловушками, модель Насырова-Гриценко [2].

Эта модель работает при высокой концентрации ловушек. Вероятность ионизации дается выражением

$$P = \frac{2\sqrt{\pi}\hbar W_T}{m^* a^2 \sqrt{2kT(W_{opt} - W_T)}} \exp \left(-\frac{W_{opt} - W_T}{kT} \right) \exp \left(-\frac{2a\sqrt{2m^*W_T}}{\hbar} \right) \sinh \left(\frac{eFa}{2kT} \right)$$

Эта модель описывает проводимость диэлектриков с высокой концентрацией ловушек, HfO₂, ZrO₂, Ta₂O₅, HfZrO, SiO₂ (SILC), low-k диэлектрики, органические полимеры.

Работа поддержана грантом РФФ № 22-13-00108

Литература

1. Makram-Ebeid, S. S. Quantum model for phonon-assisted tunnel ionization of deep levels in a semiconductor / S. S. Makram-Ebeid, M. Lannoo. // Physical Review B. — 1982. — Т. 25. — 6406 с.
2. Nasyrov, K. A. Charge transport in dielectrics via tunneling between traps / K. A. Nasyrov, V. A. Gritsenko. // Journal of Applied Physics. — 2011. — Т. 109. — № 9.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ ДИРАКА И РАШБЫ В ТОПОЛОГИЧЕСКИ НЕТРИВИАЛЬНЫХ ВАН-ДЕР-ВААЛЬСОВЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ

Швец И. А.¹, Чулков Е. В.^{2,3,4,5}, Еремеев С. В.⁶

- 1) *Томский госуниверситет, 634050 Томск, Россия*
- 2) *Departamento de Polimeros y Materiales Avanzados: Fisica, Quimica y Tecnologia, Facultad de Ciencias Quimicas, Universidad del Pais Vasco UPV/EHU, 20080 San Sebastian/Donostia, Spain*
- 3) *Donostia International Physics Center (DIPC), 20018 Donostia-San Sebastian, Spain*
- 4) *Centro de Fisica de Materiales (CFM-MPC), Centro Mixto CSIC-UPV/EHU, 20018 Donostia-San Sebastian, Spain*
- 5) *Санкт-Петербургский госуниверситет, 198504 Санкт-Петербург, Россия*
- 6) *Институт Физики Прочности и Материаловедения СО РАН, 634055 Томск, Россия; e-mail: eremeev@ispms.tsc.ru*

Ряд объёмных естественных сверхрешеток на основе пниктоген-халькогенидных ван-дер-Ваальсовых (вдВ) соединений с пятислойной (QL) или семислойной (SL) структурой, являющихся топологическими изоляторами, а также сверхрешеток с чередованием QL и SL вдВ блоков ранее были теоретически предсказаны и экспериментально изучены [1,2]. В таких сверхрешетках при сколе кристалла возникают террасы с неэквивалентными поверхностными окончаниями. В результате при экспериментальных измерениях поверхности образца в электронных энергетических спектрах одновременно наблюдаются несколько состояний с линейной дираковской дисперсией, а также имеются и другие особенности, отличающие их от спектра поверхности трехмерных ТИ, состоящих исключительно из структурных блоков QL или SL. А именно, наблюдается сложная зависимость пространственного распределения от импульса с большой длиной локализации и более сложной дисперсией. Мы показываем [3], что, в сверхрешетках с чередованием QL и SL вдВ блоков состояние Дирака сопровождается возникающими спин-поляризованными состояниями типа Рашбы. Эта особенность обусловлена неэквивалентностью поверхностных и приповерхностных структурных блоков и изгибом электростатического потенциала вблизи поверхности. В рамках теории функционала плотности (DFT) и расчетов сильной связи (ТВ) мы анализируем особенности этих состояний в зависимости от окончания поверхности, структурных параметров и химического состава. Установлено, что их возможная гибридизация с состоянием Дирака существенно влияет на его дисперсию и пространственную локализацию. Мы также анализируем влияние собственного магнетизма на поведение поверхностных состояний для магнитных сверхрешеток QL/SL.

Литература

1. Eremeev S.V. et al., Atom-specific spin mapping and buried topological states in a homologous series of topological insulators // Nature Communications — 2012 — V. 3 — P. 635.
2. Eremeev S.V., Rusinov I.P., Chulkov E.V., Part C, Ch. 15 Natural Topological Insulator Heterostructures in Springer Handbook of Surface Science, Eds: Mario Rocca, Talat Rahman, and Luca Vattuone, 1260 p., Springer — 2020.
3. Shvets I.A., Chulkov E.V., Eremeev S.V., Interplay between surface Dirac and Rashba states specific for topologically nontrivial van der Waals superlattices, to be published.

СФЕРОЛИТОВЫЕ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКИ И ЭФФЕКТ ГОРСКОГО

Пронин И. П.¹

1) ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Отделение физики диэлектриков и полупроводников,
e-mail: Petrovich@mail.ioffe.ru

К сферолитам относятся поликристаллические соединения, рост которых происходит посредством малоуглового ветвления и приводит к образованию форм, близких к сферическим. Такие кристаллические структуры широко распространены в природе, присущи различного рода органическим и неорганическим материалам, которые классифицируются по шести различным типам [1]. В настоящее время возрастающий интерес к исследованию материалов, отличающихся сферолитовой микроструктурой, вызван возрастающим использованием тонких пленок в различных высокотехнологических отраслях, в том числе, в микроэлектронике и микроэлектромеханике. Как правило, кристаллизация таких структур в форме радиально разрастающихся плоских цилиндров осуществлялась путем высокотемпературного отжига предварительно осажденных на подложку аморфных пленок. Различие плотностей аморфной и кристаллических фаз приводит к появлению сильных растягивающих в плоскости подложки механических напряжений и, как следствие, к радиальному вращению (повороту) кристаллической решетки и изгибной деформации сферолитов. Часто подобные кристаллические формы называют ротационными кристаллами, приводятся примеры таких образований [2].

В тонкопленочных сферолитовых сегнетоэлектриках особенности микроструктуры и физических свойств до последнего времени практически не исследовались, хотя образование сферолитов, отличающейся радиально-лучистой микроструктурой, не раз фиксировалось. Для исследования практически важных тонких пленок ЦТС, полученных двухстадийным методом ВЧ магнетронного распыления, нами использовались методы сканирующей электронной микроскопии, дифракции обратно отраженных электронов, силовой микроскопии пьезоэлектрического отклика, генерации второй оптической гармоники и методов измерения диэлектрических свойств тонких пленок. Показано, что увеличение размера сферолитовых блоков приводило к росту механических напряжений, увеличению скорости разворота кристаллической решетки, кратному увеличению сигнала второй оптической гармоники в сплошных однофазных пленках, а в островковых сферолитах - к эффектам возникновения радиально-ориентированной самополяризации и электронного Кикучи каналирования. Наличие изгибной деформации в сферолитовых пленках позволило использовать аппарат, развитый для сплавов Горским [3] и его последователями, для исследования и объяснения направленной (восходящей) диффузии заряженных вакансий в сегнетоэлектрических тонких пленках, провести оценку параметров диффузии в них, что позволило рассматривать эффект Горского в качестве одного из основных механизмов, приводящих к эффекту спонтанного возникновения макроскопической поляризации.

Финансирование: работа поддержана Российским научным фондом, № 24-22-00361.

Литература

1. Shtukenberg A.G., Punin Y.O., Gunn E., Kahr B. Spherulities // – Chemical Reviews (2012) **112**, iss. 3, p.1805-1838.
2. Kolosov V.Yu., Thö1én A.R. Transmission electron microscopy studies of the specific structure of crystals formed by phase transition in iron oxide amorphous films // – Acta Materialia (2000) **48**, p.1829-1840.
3. Gorsky W.S. Theorie des elastischen Nachwirkung in ungeordneten Mischkristallen (elastische Nachwirkung zweiter Art) // - Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion (1935) **8**, p.457-471.

СЕКЦИЯ 1

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕНОСА, НАКОПЛЕНИЯ И РЕЛАКСАЦИИ ЗАРЯДА

Отклонения высокочастотной проводимости неупорядоченных полупроводников от универсальности с ростом температуры

Ормонт М. А.¹, Валенко Н. В.¹, Ляшенко А. А.¹

1) МГУ, физический факультет, кафедра физики полупроводников, e-mail: ormont.73@mail.ru

Степенная частотная зависимость проводимости $\sigma(\omega) \sim \omega^s$ (как правило, $0.5 < s < 1$) хорошо описывает $\sigma(\omega)$ неупорядоченных полупроводников в широком диапазоне частот. Исследование отклонений $\sigma(\omega)$ от универсальности ($s \approx 1$) позволяет выяснить особенности механизма переноса носителей заряда. К примеру, при низких температурах ($T \approx 1\text{K}$) в Si:P, Si:B в терагерцовой области частот наблюдался переход от почти линейной к квадратичной зависимости $Re \sigma(\omega)$ [1]. Степенная частотная зависимость проводимости указывает на прыжковый характер транспорта, причем $s \approx 1$ обычно связывают с переносом электронов по примесной зоне с участием фононов. С ростом частоты бесфононный вклад в проводимость начинает преобладать над релаксационным. Теория бесфононной проводимости предсказывает кроссовер с ростом частоты от почти линейной зависимости $Re \sigma(\omega)$ к квадратичной ($s \approx 2$) [2]. Однако в рамках представлений о переменной длине прыжка r_ω , зависящей от частоты, при типичных значениях параметров теория не описывает поведение низкотемпературной проводимости неупорядоченных полупроводников в области перехода. Проведенный в [3] в парном приближении расчет вещественной части низкотемпературной проводимости показал, что переход к квадратичной зависимости $Re \sigma(\omega)$ с ростом частоты может быть связан с переходом от проводимости с переменной длиной прыжка r_ω к проводимости с постоянной длиной прыжка r_{opt} . Согласно [3] при высоких частотах, когда эффекты гибридизации несущественны, основной вклад в проводимость вносят электронные переходы внутри пар с межцентровым расстоянием $r_{opt} \approx 4a$; a – радиус локализации состояний. Как и в случае низких температур ($e^2/kr_\omega, \hbar\omega > kT$), в условиях $kT > \hbar\omega, e^2/kr_{opt}$ в области высоких частот для бесфононной проводимости происходит переход к постоянной длине прыжка. Согласно [4] переход от переменной $r_\omega = a \ln(\omega_c/\omega)$ к постоянной длине прыжка r_{opt} происходит при $r_\omega \approx r_{opt}$ ($\omega_{opt} \approx 0.02\omega_c$); для Si:P $\omega_c/2\pi \sim 10^{13}$ Гц. При низких частотах $\omega < \omega_{opt}$ ($r_\omega > r_{opt}$) в режиме с переменной длиной прыжка r_ω для бесфононной проводимости имеем $Re \sigma(\omega) \sim r_\omega^4 \omega^2$. При высоких частотах $\omega > \omega_{opt}$ ($r_{opt} > r_\omega$) в режиме с постоянной длиной прыжка r_{opt} : $Re \sigma(\omega) \sim \omega^2$. Для бесфононной проводимости частота перехода от переменной к постоянной длине прыжка порядка частоты кроссовера, в окрестности которой происходит переход от релаксационной проводимости к бесфононной. Таким образом, с ростом температуры переход к квадратичной зависимости $Re \sigma(\omega)$ может сохраняться и обуславливаться переходом от релаксационной проводимости с переменной длиной прыжка к бесфононной проводимости с постоянной длиной прыжка с ростом частоты.

Литература

1. Helgren E., Armitage N., Gruner G. The Frequency Dependent Conductivity of Electron Glasses // Physical Review B. –2004. – Jan. – Vol. 69, pp. 014201-1–15.
2. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Бесфононная прыжковая проводимость неупорядоченных систем на переменном токе // ЖЭТФ. –1981. – т. 54. – с. 406 – 415.
3. Ормонт М.А., Звягин И.П. Высокочастотная проводимость неупорядоченных полупроводников в области перехода от линейной к квадратичной частотной зависимости // ФТП. – 2020. – т. 54, вып. 1. – с. 36 – 43.
4. Ормонт М.А., Валенко Н.В. Особенности поведения высокочастотной проводимости неупорядоченных полупроводников с ростом температуры // ФТТ. – 2023. – т. 65, вып. 7. – с. 1244 – 1250.

ОСОБЕННОСТИ ВЫСОКОЧАСТОТНЫХ ВОЛЬТ-ЕМКОСТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК МДП-СТРУКТУР С ФТОРИДОМ САМАРИЯ

Сачук Н. В.¹, Шалимова М. Б.²

1) Самарский университет, физический факультет, кафедра физики,
e-mail: sachuk.nv@ssau.ru

2) Самарский университет, физический факультет, кафедра физики твердого тела и
неравновесных систем, e-mail: shamb@ssau.ru

Введение германия (Ge) в качестве альтернативного материала канала в устройствах металл – диэлектрик - полупроводник (МДП) является очень выгодным благодаря своей высокой подвижности дырок. Главным препятствием является недостаточная пассивация на границе раздела Ge/диэлектрик. В работе [1] показано, что La_2O_3 обеспечивает хорошую электрическую пассивацию для Ge-подложки с точки зрения плотности ловушек на границе раздела и способности к масштабированию, в работе [2] качество пассивации улучшалось при использовании слоя Al_2O_3 .

В настоящей работе наблюдалось специфическое поведение вольт-емкостных характеристик Ge-МДП-конденсаторов при комнатной температуре, которое проявляется как значительный рост емкости в режиме инверсии для кривых емкость-напряжение при высоких частотах измерения. На рис. 1 представлены высокочастотные (1 МГц) C-V характеристики МДП - структур Al-SmF₃-nGe при положительном заряде в слое диэлектрике и на границе раздела фторид самария/германий $(3-7) \cdot 10^{-8}$ C/cm². Также показана расчетная низкочастотная кривая идеальной удельной емкости МДП-структуры на подложке германия. Толщина диэлектрика в исследованных структурах составляла от 0,29 мкм до 0,4 мкм.

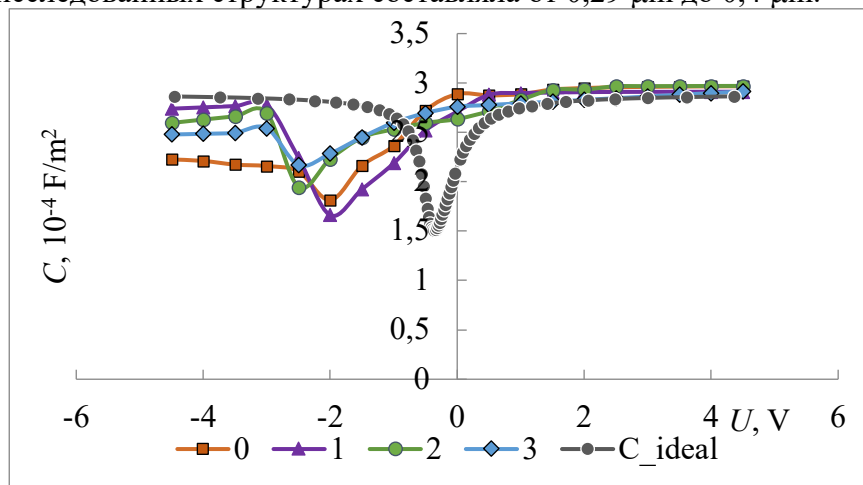


Рис. 1. Зависимость высокочастотной экспериментальной удельной емкости (1 МГц) и расчетной идеальной удельной емкости (C_{ideal}) от напряжения структуры Al-SmF₃-nGe

Анализ показывает, что на сценарий «низкочастотного» поведения исследованных МДП – структур с фторидом самария влияет величина эффективного заряда, толщина слоя диэлектрика, и величина плотности поверхностных состояний на границе раздела фторид самария/германий.

Литература

- Bethgea O., Henkela C., Abermannb S., Pozzovivoa G., Stoeger-Pollachc M., Werner d W.S.M., Smolinera J., Bertagnolli E. Stability of La_2O_3 and GeO_2 passivated Ge surfaces during ALD of ZrO_2 high-k dielectric // Applied Surface Science. – 2012. - V. 258, p. 3444– 3449.
- Berghuis W. J. H., Melskens J., Macco B., Theeuwes R. J., Verheijen M. A., Kessels W. M. M. Surface passivation of germanium by atomic layer deposited Al_2O_3 nanolayers // Journal of Materials Research. – 2021. - V. 36, p. 571-581.

МОДЕЛЬ ПОВЕДЕНИЯ МОП-СТРУКТУР ПРИ РАДИАЦИОННО-ТЕРМИЧЕСКИХ ОБРАБОТКАХ

Александров О. В.¹, Мокрушина С. А.¹

*1) Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»,
факультет электроники, кафедра электронного приборостроения,
e-mail: Aleksandr_ov@mail.ru*

Одним из способов повышения радиационной стойкости МОП-структур является радиационно-термические обработки (РТО) [1-3], заключающиеся в проведении ионизирующего облучения (ИО) и последующего термоотжига. Эффект связывался с релаксацией механических напряжений при ИО, восстановлении разорванных валентных связей Si-O и уменьшением плотности ловушечных центров при последующей термообработке. Показано, однако, что релаксация объёмного заряда SiO₂, образовавшегося при ИО, происходит при термоотжиге без изменения плотности ловушек [4,5].

В настоящей работе разработана количественная модель поведения МОП-структур при РТО на основе механизма преобразования водородосодержащих ловушек в безводородные с меньшим сечением захвата без изменения плотности ловушек.

Модель основана на захвате дырок, образующихся при ионизирующем облучении, водородосодержащими ловушками, что стимулирует разрыв водородной связи и превращение их в безводородные ловушки с меньшим сечением захвата по реакции:



Составлены и численно решаются совместно с уравнением Пуассона диффузионно-кинетические уравнения, учитывающие диффузию, дрейф и реакции взаимодействия ловушек с дырками, электронами и ионами водорода. Учитывается уход водорода на обе межфазные границы SiO₂-Si (подложка) и SiO₂-затвор, а также релаксация объёмного заряда оксида при термоотжигах. Расчёты по модели сравниваются с экспериментальными данными [3,6]. Из расчётов видно, при увеличении числа циклов облучение-отжиг происходит уменьшение сдвига порогового напряжения после ИО с тенденцией выхода на постоянный уровень. Это обусловлено тем, что водород, освобождающийся при ИО по реакции (1), уходит из МОП-структуры и таким образом ускоряет превращение водородосодержащих ловушек в безводородные. Величина постоянного уровня определяется сечением захвата и начальным количеством безводородных ловушек. Сдвиг поверхностной составляющей порогового напряжения при увеличении числа циклов меняется мало, что связано с тем, что подвижный водород, отвечающий за появление поверхностных состояний, покидает подзатворный оксид МОП-структуры как в процессе ИО, так и особенно при последующих термоотжигах.

Литература

1. Попов В.Д., Протопопов Г.А. Радиационно-термическая обработка МОП-приборов и интегральных схем // Palmarium Academic Press, 2013.
2. Воронкова Г.М., Попов В.Д., Протопопов Г.А. // ФТП (2007) **41**, №8, с.977-980.
3. Hwu J.-G., Fu S.-L. // Solid-State Electron. (1989) **32**, № 8, p.651-621.
4. McWhorter P.J., Miller S.L., Miller W.M. // IEEE Trans. Nucl. Sci. (1990) **37**, №6, p.1682-1689.
5. Lelis A.J., Oldham T.R., Boesch H.E., McLean F.B. // IEEE Trans. Nucl. Sci. (1989) **36**, №6, p.1808-1815.
6. Александров О.В., Мокрушина С.А., Фомин В.Н. // Материалы XIII международной конференции «Физика диэлектриков», СПб, 2014, т.1, с.141-143.

МОДЕЛЬ ПОВЕДЕНИЯ МОП-СТРУКТУР ПРИ ТЕРМОПОЛЕВЫХ ОБРАБОТКАХ

Александров О. В.¹, Морозов Н. Н.¹

1) Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»,
факультет электроники, кафедра электронного приборостроения,
e-mail: Aleksandr_ov@mail.ru

При термополевых обработках (ТПО) МОП-структур с положительным напряжением на затворе $+V_G$ может наблюдаться нестабильность порогового напряжения (Positive Bias Temperature Instability (PBTI)) [1]. Это явление связывается с транспортом подвижных ионов примесей щелочноземельных металлов (в основном Na^+) от затвора к кремниевой подложке в электрическом поле подзатворного диэлектрика. Для описания кинетики накопления подвижного заряда при ТПО были предложены две основные модели: диффузионная модель Сноу [2] и модель пограничного захвата (interface trapping model) Хофстейна [3]. Первая позволяет объяснить симметричное поведение порогового напряжения при смене полярности смещения, а вторая – асимметричное. Однако экспериментальные кинетики накопления и восстановления заряда отклоняются от рассчитанных по этим моделям зависимостей [2,3]. Отклонение может быть связано с захватом примеси на ловушки, находящиеся в объёме диэлектрика и приводящие к замедлению скорости переноса ионов примеси [4]. Причём в структуре аморфного диоксида кремния ловушки могут быть не моно-, а полиэнергетическими, то есть иметь разброс (дисперсию) по энергиям связи.

Целью работы является разработка модели поведения МОП-структур при ТПО, учитывающая захват примеси на полиэнергетические ловушки в объёме диэлектрика.

Полагается, что ионы примеси в процессе своего транспорта могут захватываться на нейтральные ловушки T_i^0 в объёме диоксида кремния с образованием положительно заряженных комплексов NT_i^+ : $\text{Na}^+ + T_i^0 \xrightleftharpoons[k_{2i}]{k_{1i}} NT_i^+$, $i = 1, 2 \dots n$ (1), где k_{1i} и k_{2i} – константы

скоростей прямой и обратной реакций примеси с i -ой ловушкой, $k_{1i} = 4\pi RD$, R – радиус сечения захвата, D – коэффициент диффузии свободных ионов, $k_{2i} = \nu \exp(-E_{bi} / kT)$, ν – частота колебаний атомов, E_{bi} – энергии связи иона с i -ой ловушкой. Распределение ловушек по энергиям имеет экспоненциальный вид, характерный для аморфных материалов: $C_{Ti}(x, E_{bi}) = C_T(x) \exp(-E_{bi} / E_0)$, где E_0 – характеристическая энергия. Поведение компонентов реакции (1) описывается системой диффузионно-кинетических дифференциальных уравнений и уравнения Пуассона, которые решались численно. Решения сравнивались с экспериментальными кинетиками порогового напряжения МОП-структур в режимах накопления (при $+V_G$) и восстановления (при $-V_G$ после накопления). Показано, что расчёты по модели хорошо описывают поведение МОП-структур при ТПО как с симметричным, так и с асимметричным поведением. Определён диапазон энергий связи полиэнергетических ловушек и ширина области их локализация у затвора и у Si-подложки.

Литература

1. Zhang J.F. et al. Bias temperature instability of MOSFETs: physical processes, models, and prediction // *Electronics* (2022) **11**, №9, с.1420.
2. Snow E.H. et al. Ion transport phenomena in insulating films // *J. Appl. Phys.* (1965) **36**, №5, с.1664-1673.
3. Hofstein S.R. An investigation of instability and charge motion in metal-silicon oxide-silicon structures // *IEEE Trans. El. Dev.* (1966) **13**, №12, с.222-237.
4. Александров О.В., Морозов Н.Н. Влияние ловушек на накопление подвижного заряда в МОП-структурах при термополевых обработках // *Изв. СПбГЭТУ «ЛЭТИ»* (2023) **16**, №6, с.20-28.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПОЛИИМИДНЫХ ПЛЕНОК С РАЗНОЙ ЖЕСТКОСТЬЮ МАКРОМОЛЕКУЛ МЕТОДОМ ТЕРМОАКТИВАЦИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Павлов А. А.¹, Борисова М. Э.¹, Камалов А. М.², Диденко А. Л.²

1) Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Институт энергетики, Высшая школа высоковольтной энергетики, e-mail: pavlov_aa@spbstu.ru

2) НИЦ «Курчатовский институт», ИВС РАН, e-mail: spb.kamalov@gmail.com

В настоящее время терморезистивные полиимидные материалы широко используются в промышленности, в том числе в области изоляционной техники в качестве изоляции кабелей и конденсаторов, особенно в условиях жестких режимов эксплуатации. Интерес к полиимидам обусловлен их работоспособностью в широком интервале температур, высокими электрическими и механическими характеристиками.

Особое внимание уделяется созданию термопластичных полиимидов. Преимуществом термопластичного полиимида является возможность повторной переработки, что позволяет снизить стоимость изготовления материала. Целью данной работы является изучение электрических и электретных свойств полиимидов методом термоактивационной спектроскопии.

В качестве объектов исследования использовались полиимидные пленки Р-СОД, ДФО-ДАДФЭ, ПМ-ДАДФЭ и ДФ-Б, имеющие разную жесткость макромолекул.

Название	Сегмент Куна [1], Å
Р-СОД (термопластичный)	20
ДФО-ДАДФЭ	38
ПМ-ДАДФЭ	72
ДФ-Б	148

Метод токов термостимулированной деполяризации (ТСД) используется для исследования диэлектрических свойств материалов и их электретных характеристик. Анализ токов ТСД позволяет получить информацию о природе электретного состояния, установить механизм релаксации заряда, а также может быть использован для оценки стабильности электрета. Токи термостимулированной деполяризации измерялись при постоянной скорости нагрева 2 °К/мин с использованием изолирующей прокладки между поверхностью образца и электродом. Полученные зависимости тока от температуры были проанализированы на основе представлений о дискретных элементарных дебаевских максимумах [2], определены энергии активации процесса релаксации заряда, составляющие 1,19 (Р-СОД), 0,93 (ДФО-ДАДФЭ), 1,20 (ПМ-ДАДФЭ) и 0,95 (ДФ-Б) эВ. Полученные зависимости собственной проводимости полиимидов от температуры согласуются с непосредственно измеренными зависимостями, что свидетельствует о том, что жесткость макромолекул не влияет на процессы электропереноса в полиимидных диэлектриках.

Авторы выражают благодарность студенту 4 курса ИЭ ВШВЭ Новикову Владиславу за помощь в проведении расчетов.

Литература

- Назарычев В.М. Полноатомное компьютерное моделирование термопластичных полиимидов с варьируемой структурой диаминных фрагментов // дисс. канд. физ.-мат. наук, СПб – 2015.
- Борисова М.Э. Галюков О.В., Цацынкин П.В. Физика диэлектрических материалов. Электроперенос и накопление заряда в диэлектриках // СПб.: СПбГПУ – 2004.

СЕНСИБИЛИЗИРОВАННЫЕ КРАСИТЕЛЕМ ФОТОПРОЦЕССЫ В КРЕМНИИ

Горяев М. А.¹

1) Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, институт физики, кафедра физической электроники, e-mail: mgoryaev@mail.ru

Солнечные кремниевые батареи должны иметь сравнительно большую толщину, т.к. этот полупроводник имеет невысокий коэффициент экстинкции в области непрямых переходов [1]. Органические красители имеют большой коэффициент экстинкции в видимой и ближней инфракрасной области спектра и широко используются для сенсibilизации фотоэлектрических и фотохимических процессов в твердых телах [2, 3]. Нами обнаружена эффективная сенсibilизация красителями фотопроводимости порошкообразного кремния на постоянном токе [4], а также показана возможность сенсibilизации фото-ЭДС в монокристаллическом кремнии [5]. В настоящей работе исследованы фотовольтаический эффект в образцах кремния с различным типом проводимости и изменение его спектров при нанесении на поверхность полупроводника органического красителя.

При нанесении красителя на поверхность полупроводника *n*-типа с увеличением концентрации красителя фото-ЭДС происходит спектральная сенсibilизация фотоэффекта: он в полосе поглощения красителя увеличивается вдвое. Фото-ЭДС имеет диффузионную природу, и ее величина и знак определяется разностью подвижностей электронов и дырок. В кремнии подвижность дырок в несколько раз меньше подвижности электронов [6], поэтому основной вклад в изменение фото-ЭДС вносят генерированные электроны. В неокрашенном образце *n*-типа фото-ЭДС также обусловлена электронами, поэтому при нанесении красителя наблюдается рост величины ЭДС за счет электронов, появляющихся в результате передачи энергии фотовозбуждения от красителя полупроводнику.

Фото-ЭДС образцов монокристаллического кремния *p*-типа монотонно убывает в полосе поглощения красителя по мере увеличения его концентрации на поверхности полупроводника. Полярность дополнительной фото-ЭДС за счет генерированных при передаче энергии фотовозбуждения от красителя полупроводнику носителей противоположна фото-ЭДС, обусловленной основными носителями кремния *p*-типа, что приводит к десенсибилизирующему действию красителя на фотоэффект в кремнии *p*-типа.

На порошкообразных образцах кремния как *n*-, так и *p*-типа выявлена сенсibilизация: сенсibilизированная фотопроводимость почти на два порядка превышает фотоэффект в исходных образцах. Это связано с тем, что генерированные при передаче энергии от красителя полупроводнику электроны, и дырки приводят к увеличению фотопроводимости, а высокая эффективность сенсibilизации обусловлена большей удельной поверхностью порошкообразного кремния по сравнению с монокристаллическим.

Литература

1. Алферов Ж.И., Андреев В.М., Румянцев В.Д. Тенденции и перспективы развития солнечной фотоэнергетики. // – Физ. и техн. полупр. (2004) **38**, № 8, с.937–948.
2. Акимов И.А., Черкасов Ю.А., Черкашин М.И. Сенсibilизированный фотоэффект. // М.: Наука – 1980.
3. Gratzel M. J. Dye-sensitized solar cells // – Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev. (2003) **4**, №2, p.145-153.
4. Горяев М.А. Сенсibilизация фотопроводимости поликристаллического кремния красителями // – Ж. физ. химии. (2015) **89**, №12, с.1940-1942.
5. Горяев М.А. Спектральная сенсibilизация фото-ЭДС в монокристаллическом кремнии // – Опт. и спектр. (2019) **127**, №1, с.167-169.
6. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. //, М.: Наука – 1977.

ГЕНЕРАЦИЯ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПИРОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО И ПЬЕЗОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА

Олейник А.¹, Гильц М.¹, Кубанкин А.^{1,2}, Сотникова В.^{1,3}, Шаповалов П.^{1,4}

¹ *Лаборатория радиационной физики, Белгородский государственный национальный исследовательский университет, Белгород, Россия*

² *Физический институт им. П.Н. Лебедева, Москва, Россия*

³ *Белгородский государственный технологический университет им. В.Г. Шухова, Белгород, Россия*

⁴ *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия*

В последние тридцать лет сложился нестандартный подход к созданию компактных ускорителей заряженных частиц, основанный на электризации диэлектрических материалов при изменении их температуры (пироэлектрический эффект) или изменении их формы (пьезоэлектрический эффект). При пироэлектрическом эффекте существуют два основных условия генерации частиц: изменяется температура пироэлектрического материала и сам материал помещен в условия вакуума. В этих условиях индуцированный электрический заряд на поверхности пироэлектрического материала не экранируется окружающей средой, что позволяет ему накапливаться на поверхности. Создаваемое электрическое поле приводит к эффекту автоэлектронной эмиссии с поверхности пироэлектрического образца или окружающих элементов. В случае пьезоэлектрического эффекта необходимо обеспечить деформацию пьезоэлектрического материала и контакт его со специальным электродом для накопления заряда и последующей автоэлектронной эмиссии электронов. Пироэлектрические и пьезоэлектрические ускорители могут обеспечить поток электронов с энергией до 100 кэВ и полным током около 1 нА.

В Лаборатории радиационной физики НИУ БелГУ систематически исследуются эффекты генерации электронов и рентгеновских лучей при пироэлектрическом эффекте в монокристаллах танталата и ниобата лития [1-3] и при пьезоэлектрическом эффекте в керамике цирконат-титаната свинца [4]. Представлены основные результаты, полученные нашей группой, обсуждаются основные проблемы пироэлектрических ускорителей, открытые фундаментальные вопросы и перспективы.

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке конкурсной части госзадания по созданию и развитию лабораторий, проект № FZWG-2020-0032 (2019-1569)

Литература

1. A.S. Cherpurnov, O.O. Ivashchuk, E.P. Kitsyuk, A.A. Klenin, A.S. Kubankin, R.M. Nazhmudinov, A.N. Oleinik, A.A. Pavlov and A.V. Shchagin, Carbon nanotubes in pyroelectric X-ray source, Journal of Instrumentation, 2017 JINST 12 P11002, doi: 10.1088/1748-0221/12/11/P11002
2. P. Karataev, A. Oleinik, K. Fedorov, A. Klenin, A. Kubankin, A. Shchagin, Indicators of upcoming electric breakdown in a pyroelectric accelerator, Applied Physics Express 15, 066001 (2022), doi: 10.35848/1882-0786/ac6b82
3. A. Oleinik, M. Gilts, P. Karataev, A. Kubankin, P. Shapovalov I-V curve of the electron flow generated during a pyroelectric effect in lithium tantalate single crystal in vacuum conditions, Europhysics Letters, (2023) 142 34001, doi: 10.1209/0295-5075/accca6
4. O. Ivashchuk, A. Shchagin, A. Kubankin, I. Nikulin, A. Oleinik, V. Miroshnik, V. Volkov, Piezoelectric Accelerator, Sci. Rep. 8 (2018) 16488. doi: 10.1038/s41598-018-34831-8

МЕХАНИЗМ ТРАНСПОРТА ЗАРЯДА В ОРГАНИЧЕСКОЙ ПЛЕНКЕ НА ОСНОВЕ ФТОРИРОВАННОГО ПОЛИАРИЛОВОГО ЭФИРА, СОДЕРЖАЩЕГО БЛОКИ В ЦЕПИ 1,4-ДИОКСО-ТИОКСАНТЕН-9-ОНА

Гисматулин А. А.¹, Одинцов Д. С.², Оськина И. А.², Шундрин И. К.², Шундрин Л. А.²,
Азаров И. А.¹, Гриценко В. А.¹

1) ИФП СО РАН, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева 13, e-mail: aagismatulin@isp.nsc.ru
2) НИОХ СО РАН, Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева 9

К основным преимуществам органических устройств перед кремниевыми устройствами относятся: низкая стоимость материалов, недорогое и экологически чистое производство электронных элементов с помощью технологий печати, их универсальные свойства, такие как малый вес, гибкость, прозрачность, долговечность и надежность [1]. Проводятся интенсивные разработки энергонезависимой мемристорной памяти на основе органических пленок [2]. Ключевыми требованиями к органическим полимерам, используемым в мемристорных технологиях, являются их термостабильность и амбиполярная природа. Одним из перспективных полимеров является фторированный полиариловый эфир с тиоксантеновым блоком (1,4-диоксо-тиоксантен-9-она) в цепи, который синтезирован взаимодействием перфторбифенила и 1,4-дигидрокси-9Н-тиоксантен-9-она. Полимер имеет запрещенную зону величиной около 3 эВ. Были синтезированы пленки полимера толщиной 110 нм для изучения механизма транспорта заряда. Для мемристорной структуры использовалась пленка полимера толщиной 25 нм.

Механизм транспорта заряда в тонкой пленке фторированного полиарилового эфира исследован путем измерения плотности тока от электрического поля, соответствующих МДП-структур, при различных температурах и моделирования экспериментальных данных с использованием модели Френкеля и модели Насырова-Гриценко фонон-облегченного туннелирования между ловушки. Показано, что модель Френкеля не описывает экспериментальные результаты, предсказывая аномально высокое значение высокочастотной диэлектрической проницаемости и аномально низкую концентрацию ловушек. Напротив, модель фонон-облегченного туннелирования между ловушки Насырова-Гриценко количественно описывает экспериментальные данные и дает термическую ($W_t=0,9$ эВ), оптическую ($W_{opt}=1,8$ эВ) энергии ионизации ловушек и разумную концентрацию ловушек ($N=1,0 \times 10^{20}$ см⁻³) в пленке фторированного полиарилового эфира. Таким образом, мы показали, что транспорт заряда в пленке фторированного полиарилового эфира с тиоксантеновым блоком в цепи хорошо описывается многофононным механизмом, как это имеет место в полупроводниках и неорганических диэлектриках. Пленка фторированного полиарилового эфира также может успешно использоваться в качестве активного слоя мемристора. Мемристорная структура на основе этого полимера имеет низкие напряжения переключения и высокое соотношение сопротивления в высокоомном и низкоомном состояниях мемристора (4 порядка), что является преимуществом для использования пленки фторированного полиарилового эфира в технологии резистивной памяти.

Финансирование: исследование выполнено за счет средств гранта РФФИ № 22-13-00108.

Литература

1. Kronemeijer A. J., Pecunia V., Venkateshvaran D., Nikolka M., Sadhanala A., Moriarty J., Szumilo M., Siringhaus H. Two-dimensional carrier distribution in top-gate polymer field-effect transistors: correlation between width of density of localized states and Urbach energy // Adv. Mater. (2014) **26**, p.728–733.
2. Yuan L., Liu S., Chen W., Fan F., Liu G. Organic memory and memristors: from mechanisms, materials to devices // Adv. Elec. Mater. (2021) **7**, №11, p. 2100432.

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ФОТОГЕНЕРАЦИИ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

Никитенко В. Р.¹, Торопин А. В.¹

1) *Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ», кафедра Физики конденсированных сред, e-mail: VRNikitenko@mephi.ru*

В последние десятилетия проводятся интенсивные исследования неупорядоченных органических материалов, в том числе для применений в фотовольтаических элементах. Поскольку диэлектрическая проницаемость мала, обычно от 2 до 4, кулоновское взаимодействие между электронами и дырками существенно на расстояниях более 10 нм, т. е. много больше длины прыжка. Поэтому распад молекулярного возбуждения приводит к образованию геминальной пары, в которой электрон и дырка связаны кулоновским взаимодействием, однако совершают некоррелированное прыжковое диффузионно-дрейфовое движение в кулоновской потенциальной яме. Вероятность разделения геминальной пары определяет эффективность фотогенерации.

В недавней работе [1] для гауссова распределения прыжковых центров по энергии, исходя из уравнения баланса прыжкового транспорта, получено уравнение для концентрации носителей заряда в дисперсионном (сильно неравновесном) режиме транспорта, включая режим прыжков вниз по энергии при малых временах, $t < t_s$. Применительно к задаче о разделении геминальных пар получено уравнение Смолуховского для дисперсионного режима. В отличие от применявшегося ранее аналогичного уравнения [2], дрейфовый член содержит вместо тепловой энергии kT зависящую от времени энергию, которая приближается к kT , в согласии с соотношением Эйнштейна, лишь при больших временах, $t > t_s$, когда транспорт контролируется термоактивированными прыжками на транспортный уровень. При малых временах, $t < t_s$, диффузия аномально сильна [1]. Вероятность разделения пары получена усреднением известного результата модели Онзагера, причём функцией распределения по начальному разделению пары является полученное решение уравнения Смолуховского в момент $t = t_s$ [1]. Вероятность разделения описывается простым аналитическим выражением, $\exp[-e^2/4\pi\epsilon\epsilon_0 r_{ef}(T)kT_{ef}(r_{ef}, T, F)]$, где эффективное начальное расстояние между «близнецами», r_{ef} , определяется в рамках модели и не является независимым феноменологическим параметром. Оно значительно возрастает с уменьшением температуры, что даёт известную по данным Монте-Карло и эксперимента [3] слабую зависимость вероятности разделения от температуры. Модифицировав концепцию эффективной температуры, T_{ef} [4], удалось получить и зависимость от напряжённости внешнего поля, F , которая особенно важна при низких температурах.

Литература

1. Toropin A. V., Huang L., Nikitenko V. R., Prezhdo O. V. Extremely Non-Equilibrium Hopping Transport and Photogeneration Efficiency in Organic Semiconductors: An Analytic Approach. // *J. Phys. Chem. Lett.* (2024) **15**, p. 3884-3892
2. Архипов В. И., Никитенко В. Р., Руденко А. И. Температурная зависимость кинетики парной рекомбинации в аморфных полупроводниках. // *Физ. Техн. Полупров.* (1987) **21**, №6, с.1125-1132.
3. Im C., Emelianova E. V., Bäessler H., Spreitzer H., Becker H. Intrinsic and Extrinsic Charge Carrier Photogeneration in Phenyl-Substituted Polyphenylenevinylene-Trinitrofluorenone Blend Systems // *J. Chem. Phys.* (2002), **117**, p. 2961-2967.
4. Marianer S., Shklovskii B. I. Effective Temperature of Hopping Electrons in a Strong Electric Field. // *Phys. Rev. B* (1992), **46**, p. 13100-13103

МОДЕЛЬ ПОДАВЛЕНИЯ ПРОВОДИМОСТИ В ОРГАНИЧЕСКОМ ИОННОМ ПЛАСТИЧЕСКОМ КРИСТАЛЛЕ [P_{1,2,2,4}][PF₆]

Кушнир Д. С.¹, Хамзин А. А.²

1) Казанский Федеральный Университет, Институт Физики, Кафедра Теоретической Физики, e-mail: d.kushnir02@yandex.ru

2) Казанский Федеральный Университет, Институт Физики, Кафедра Теоретической Физики, e-mail: airat.khamzin1976@gmail.com

Цель работы состоит в разработке модели ионной динамики в ионных пластических кристаллах и выводу в рамках этой модели выражения для частотной зависимости динамической проводимости, которое позволяет описать спектры проводимости органического ионного пластического кристалла (ОИПК) [P_{1,2,2,4}][PF₆] (диэтил(метил)(изобутил)фосфоний (P_{1,2,2,4}) - гексафторфосфат (PF₆)), полученные методом широкополосной диэлектрической спектроскопии (ШДС). Для достижения поставленной цели используется аппарат релаксационной функции для плотности тока и аналитические инструменты теории случайных процессов.

В основе модели лежит механизм коррелированной динамики подвижных ионов, которая контролируется их кулоновскими взаимодействиями с ионами элементарной ячейки твердотельных фаз ОИПК. Кулоновские взаимодействия ионов с окружением приводят к стохастической межячеечной ионной динамике, которая разрушает внутри ячейечную дебаевскую ионную динамику и, как следствие, подавляет проводимость на масштабах элементарной ячейки. В рамках разработанной модели нами получено выражение для частотной зависимости динамической проводимости, которая отлично описывает наблюдаемые на эксперименте спектры проводимости ОИПК [P_{1,2,2,4}][PF₆] (см. рис. 1).

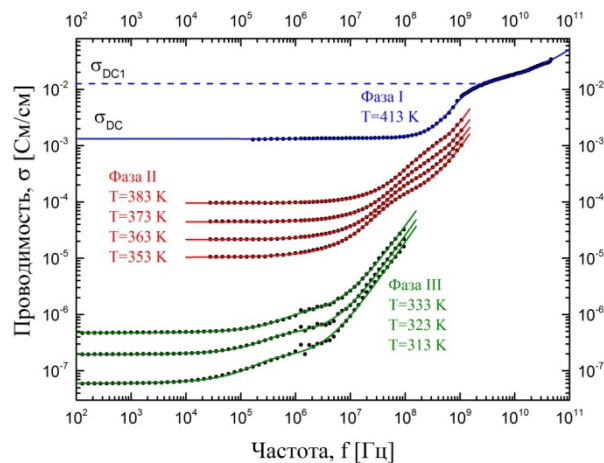


Рисунок 1. Результаты процедуры численной подгонки экспериментальных спектров проводимости (символы) ОИПК [P_{1,2,2,4}][PF₆] в твердотельных фазах I-III с помощью найденной в рамках разработанной модели теоретической зависимостью (сплошные линии). На рисунке σ_{DC} – DC проводимость, σ_{DC1} – DC проводимость без присутствия дополнительного подавления проводимости в твердотельных фазах. Экспериментальные спектры проводимости получены методом широкополосной диэлектрической спектроскопии в работе [1].

Литература

1. Popov I., Zhu H., Khamzin A., Zanelotti C., Madsen L., Forsyth M., Sokolov A. P. Collective Ion Dynamics in Ionic Plastic Crystals: The Origin of Conductivity Suppression //The Journal of Physical Chemistry C. – 2023. – V. 127. – №. 32. – P. 15918-15927.

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛОВ PbSb_2Te_4 КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ

Немов С. А.^{1,2}, Алябьев А. Ю.², Поволоцкий А. В.³, Благих Н. М.⁴

1) Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого

2) Санкт-Петербургский электротехнический университет, e-mail: alyabjev_au@mail.ru

3) Санкт-Петербургский государственный университет

4) АО «НПО Поиск», Ленинградская область, г. Мурино

Материалы, демонстрирующие уникальные квантово-механические свойства, обеспечивают прогресс в физике конденсированных сред. Именно поэтому всестороннее изучение топологических изоляторов, имеющих поверхностные состояния, представляющие собой особый тип двумерного электронного газа, открывает новые горизонты в таких областях науки и техники, как электроника, фотоника и квантовые вычисления. Кристаллы PbSb_2Te_4 и подобные им полупроводниковые тетрадимитоподобные халькогениды, обладающие сложной, слоистой структурой, соответствуют требованиям для кандидата в топологические изоляторы. Расчеты зонной структуры, представленные в работе [1] подтверждают, что исследуемый материал является потенциальным 2D и 3D топологическим изолятором. Квантовые состояния носителей заряда на границе в таком материале значительно отличаются от объёмных.

Привлекательны такие материалы и для термоэлектричества, так как наличие тяжелых атомов и многослойная структура способствуют снижению теплопроводности материала за счет фононного рассеяния при незначительном снижении электропроводности.

Синтезируемое методом Чохральского соединение PbSb_2Te_4 является полупроводником p – типа с высокой концентрацией дырок $\approx 10^{20} \text{см}^{-3}$. Это обусловлено образованием большого количества дефектов кристаллической решетки в процессе кристаллизации.

Исследуемые кристаллы, по данным рентгеноструктурного анализа [2], обладают ромбоэдрической кристаллической решеткой, для описания которой обычно используется гексагональная элементарная ячейка. Элементарная ячейка имеет параметры $a=0,4350 \text{ нм}$ и $c = 4,1712 \text{ нм}$. Слитки состоят из семислойных пакетов, $\text{Te-Sb-Te-Pb-Te-Sb-Te}$ расположенных вдоль инверсно-поворотной оси третьего порядка. Преобладающими фазами являются PbSb_2Te_4 (около 70-80 %) и Sb_2Te_3 (до 20-30 %).

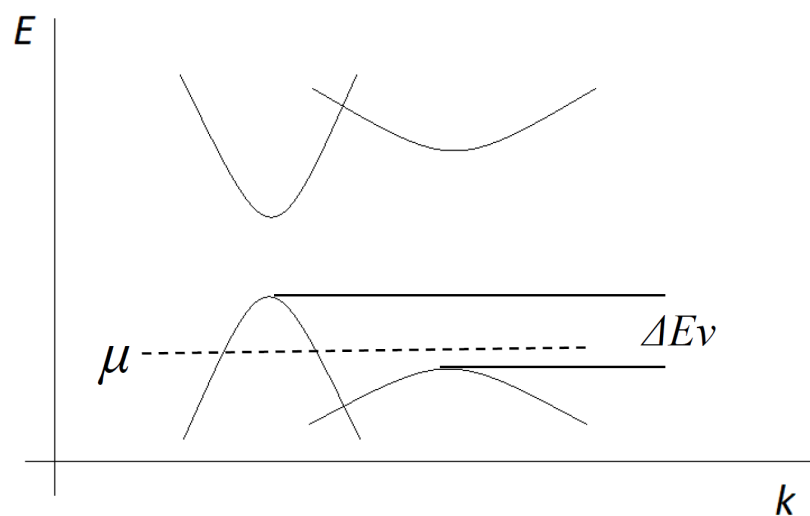


Рис. 1. Модель зонной структуры PbSb_2Te_4
 μ – химический потенциал

ΔE_v – энергетический зазор между неэквивалентными экстремумами валентной зоны

Анализ известных из литературы экспериментальных данных о температурной зависимости кинетических коэффициентов [3] показал, что имеющиеся особенности поведения, в частности значительный рост коэффициента Холла, свидетельствует о сложном строении

валентной зоны участия и в явлениях переноса нескольких типов носителей тока с различной эффективной массой. Для оценки параметров зонного спектра и механизмов рассеяния использовалась двухзонная модель, представленная на Рисунке 1.

Для более точной оценки межзонных переходов, ширины запрещённой зоны и других параметров энергетического спектра исследуемых образцов необходимо проанализировать спектральную зависимость коэффициента поглощения материала.

Как уже отмечалось ранее, исследуемые кристаллы имеют слоистую структуру и значительную концентрацию носителей, что накладывает ограничение на прямое измерение спектров поглощения. Поэтому искомые спектральные зависимости были получены с использованием дисперсионных соотношений Крамерса-Кронига на основе экспериментальных спектров отражения, снятых в видимом и ИК-диапазонах (Рисунок 2).

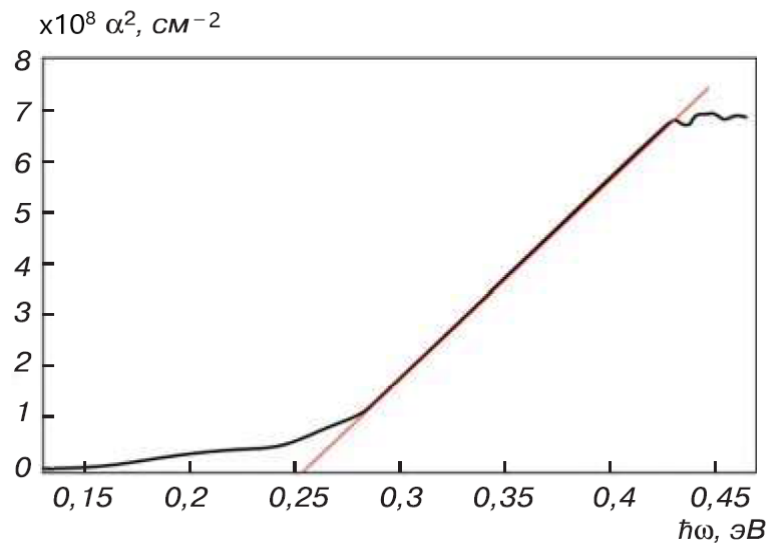


Рис.2 Спектр поглощения кристалла PbSb_2Te_4 [4]

Полученные спектры поглощения характеризуются наличием участка резкого роста коэффициента поглощения, который свидетельствует о фундаментальном межзонном поглощении с энергией активации (пороговой энергией) порядка 0,24 эВ. Учитывая, что оптические переходы идут с уровня Ферми, который при комнатной температуре для исследуемого материала составляет порядка 0,13 эВ, величина энергетического зазора между основными экстремумами валентной зоны и зоны проводимости составляет величину 0,11 эВ.

Малая ширина запрещенной зоны свидетельствует в пользу возможности реализации состояния топологического изолятора в слоях и на поверхности кристаллов PbSb_2Te_4 .

Литература

1. Силкин И.В., Коротеев Ю.М., Еремеев С.М., Бильмайер Г., Чулков Е.В. Трехмерные и двумерные топологические изоляторы в слоистых соединениях $\text{Pb}_2\text{Sb}_2\text{Te}_4$, $\text{Pb}_2\text{Bi}_2\text{Te}_5$ и $\text{Pb}_2\text{Bi}_2\text{Se}_5$ Письма в ЖЭТФ, 2011, том 94, выпуск 3, с.234–239
2. Немов С.А., Поволоцкий А.В., Алябьев А.Ю., Андреева В.Д., Ким А. Структура и свойства сплавов PbSb_2Te_4 и $\text{Pb}_2\text{Sb}_6\text{Te}_{11}$ // Сборник научных трудов «Нанопизика и Наноматериалы». 2023, С. 23 – 28.
3. Немов С.А., Благих Н.М., Андреева В.Д. Описание явлений переноса в PbSb_2Te_4 в двухзонной модели при учете межзонного рассеяния // Научные ведомости Белгородского государственного университета, серия: Математика. Физика. – 2013. №11 (154), вып. 31, С. 181 – 189.
4. Немов С. А., Поволоцкий А. В., Андреева В. Д., Кущенко А. Н., Мухараева И. Ю Оценка степени металлического состояния и перспективных свойств кристаллического PbSb_2Te_4 , полученного методом Чохральского, Цветные металлы, 8(968) 73-79 (2023)

ИОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ФЛЮОРИТОВЫХ КРИСТАЛЛОВ, ОТВЕЧАЮЩИХ СЕЛОВИННЫМ ТОЧКАМ НА ПОВЕРХНОСТЯХ ЛИКВИДУСА В СИСТЕМАХ $PbF_2-CdF_2-RF_3$ ($R = Ho, Lu$)

Сорокин Н. И.¹, Бучинская И. И.²

1) НИЦ “Курчатовский институт”, e-mail: nsorokin1@yandex.ru
2) НИЦ “Курчатовский институт”, e-mail: buchinskayaii@gmail.com

Флюоритовые твердые растворы, отвечающие составу седловинных точек на кривых плавности в системах $PbF_2-CdF_2-RF_3$ ($R = PЗЭ$), представляют большой интерес для изучения взаимосвязи ионной проводимости с особенностями кристаллического строения многокомпонентных фторидных проводников. Продолжая исследования влияния катионных замещений на ионную проводимость твердого раствора $Pb_{1-x}Cd_xF_2$, проведены измерения кристаллов $(Pb_{0.67}Cd_{0.33})_{0.7}Ho_{0.3}F_{2.3}$ и $(Pb_{0.67}Cd_{0.33})_{0.75}Lu_{0.25}F_{2.25}$ (составы отвечают седловинным точкам на поверхности ликвидуса в тройных системах [1]).

Кристаллы выращены из расплава методом Бриджмена в графитовом тигле в атмосфере CF_4 по методике [2]. Структурные исследования проведены на порошковом рентгеновском дифрактометре Rigaku MiniFlex 600, излучение $CuK\alpha$. Параметры решетки определены в программе DICVOL06. Обнаружено, что основная фаза является кубической, пр. гр. $Fm\bar{3}m$. В объеме образца с Ho также наблюдается мелкодисперсная примесная фаза M_2RF_7 ($M = Pb, Cd$), которая, по-видимому, является изоструктурной соединению Pb_2YF_7 (пр. гр. $I4$, PDF 00-037-1116). В зависимости от условий роста кристаллов ее количество может достигать 3%.

Электропроводность образцов (σ_{dc}) на постоянном токе определяли из спектров импеданса в диапазоне частот 5 Гц–500 кГц (прибор Tesla BM-507). В качестве контактов использовали серебряную пасту Leitsilber. Температурные электрофизические измерения кристаллов проведены в интервале от 546 до 818 К в режиме охлаждения.

Температурные зависимости $\sigma_{dc}(T)$ для кристаллов $(Pb_{0.67}Cd_{0.33})_{0.7}Ho_{0.3}F_{2.3}$ и $(Pb_{0.67}Cd_{0.33})_{0.75}Lu_{0.25}F_{2.25}$ удовлетворяют уравнению Аррениуса-Френкеля: $\sigma_{dc}T = A \exp[-E_a/kT]$, где A – предэкспоненциальный множитель, E_a – энергия активации ионного транспорта. В таблице приведены параметры решетки, параметры уравнения Аррениуса-Френкеля (A , E_a) и значения σ_{dc} при 500 К для трехкомпонентных твердых растворов.

Кристаллы	a , Å	A , СмК/см	E_a , эВ	$\sigma_{500 K}$, См/см
$(Pb_{0.67}Cd_{0.33})_{0.7}Ho_{0.3}F_{2.3}$	5.7004(3)	3.8×10^4	0.65 (558–676 К)	2.2×10^{-5}
$(Pb_{0.67}Cd_{0.33})_{0.75}Lu_{0.25}F_{2.25}$	5.6925(1)	2.5×10^6	0.79 (546–818 К)	5.5×10^{-5}
$Pb_{0.67}Cd_{0.33}F_2$ [2]	5.755	1.7×10^5	0.38 (293–480 К)	4.6×10^{-2}
[3]	–/–	1.2×10^5	0.36 (293–713 К)	5.8×10^{-2}

Проводимость кристаллов $(Pb_{0.67}Cd_{0.33})_{0.7}Ho_{0.3}F_{2.3}$ и $(Pb_{0.67}Cd_{0.33})_{0.75}Lu_{0.25}F_{2.25}$ меньше на ~3 порядка, чем для твердого раствора $Pb_{0.67}Cd_{0.33}F_2$. Для объяснения эффекта уменьшения фтор-ионной проводимости $Pb_{0.67}Cd_{0.33}F_2$ при замещениях Pb^{2+} (Cd^{2+}) на Ho^{3+} (Lu^{3+}) необходимо провести исследования дефектной структуры этих кристаллов.

Финансирование: работа проведена в рамках выполнения работ по Государственному заданию НИЦ «Курчатовский институт».

Литература

- Федоров П. П., Бучинская И. И. Дифторид свинца и системы с его участием // – Успехи химии (2012) **81**, №1, с.1–20.
- Сорокин Н.И., Бучинская И.И., Соболев Б.П. Ионная проводимость монокристаллов $Pb_{0.67}Cd_{0.33}F_2$ и $Pb_{0.67}Cd_{0.33}F_2: Ce^{3+}$ // – ЖНХ (1992) **37**, №12, с.2653–2656.
- Trnovcova V., Fedorov P.P., Ozvoldova M., Buchinskaya I.I., Zhurova E.A. Structural features of fluoride-ion transport in $Pb_{0.67}Cd_{0.33}F_2$ single crystals // – J. Optoelectron. Adv. Mater. (2003) **5**, №3, p.627–634.

ИМПЕДАНСМЕТРИЯ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК ЙОДИДА СЕРЕБРА, ЛЕГИРОВАННЫХ МЕДЬЮ

Ильинский А. В.¹, Кастро Р. А.², Климов В. А.¹, Кононов А. А.², Попова И. О.², Шадрин Е. Б.¹

1) ФТИ им. А. Ф. Иоффе (университет, факультет, кафедра), e-mail: jenjasha@yandex.ru

2) РГПУ им. А. И. Герцена, институт физики, кафедра физической электроники, e-mail: timof-ira@yandex.ru

Йодид серебра – материал с фазовым переходом (ФП) полупроводник-суперионный проводник при температуре 147 °С – используемый для создания суперконденсаторов, ионисторов, источников тока, преобразователей энергии и информации и т.п.

Исследованные в настоящей работе пленки AgI, легированные Cu (содержание меди 4 и 8 объемных %), были синтезированы на слюдяной подложке. Первая стадия синтеза состояла в нанесении на высококачественную (оптическую) слюду толщиной 40 мкм методом испарения в вакууме тонкого (80 nm) слоя металлов: Ag+Cu. На второй стадии синтеза при 170°С выполнялось йодирование комбинированного металлического слоя.

Диэлектрические измерения были выполнены на спектрометре фирмы Novocontrol Technologies. Ячейка спектрометра представляла собой конденсатор с электродами из двух плоских позолоченных пластин диаметром 50 mm, между которыми помещался исследуемый образец. Диэлектрические спектры (ДС) измерялись в частотном диапазоне 10⁻² Hz – 10⁷ Hz. Температура *T* образца монотонно изменялась в интервале 70 – 180°С, причем диэлектрические измерения выполнялись с шагом 5°С.

В высокочастотной области наблюдаются: максимум на частотной зависимости мнимой части $\epsilon''(f)$ и ступенька на частотной зависимости вещественной части $\epsilon'(f)$ комплексной диэлектрической проницаемости. С ростом температуры данные особенности ДС смещаются в сторону высоких частот, а в низкочастотной области отчетливо проявляются новые особенности ДС: максимум на $\epsilon''(f)$ и новая ступенька на $\epsilon'(f)$ (рисунок).

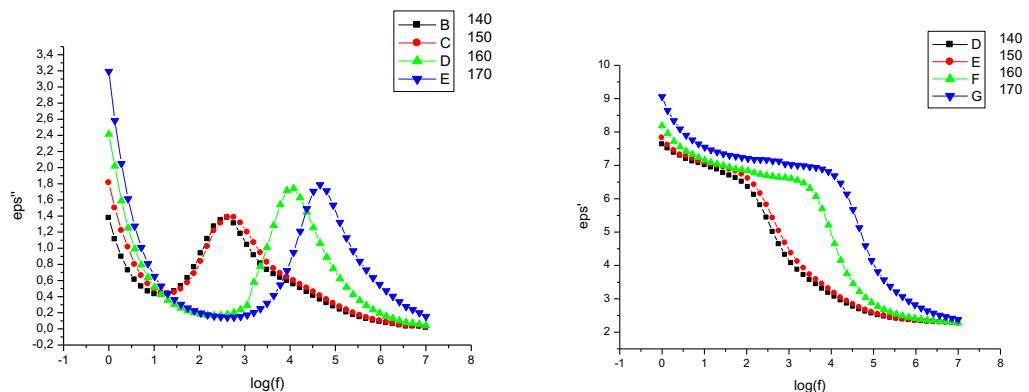


Рис. Частотные зависимости вещественной ϵ' и мнимой ϵ'' частей комплексной диэлектрической проницаемости для пленок $\text{Ag}_{0.96}\text{Cu}_{0.04}\text{I}$

Установлено, что легирование пленок AgI медью уменьшает концентрацию равновесных электронов в три раза по сравнению с нелегированными пленками. При сильном легировании медью при температурах ниже ФП диэлектрическая спектроскопия фиксирует появление амбиполярной проводимости, то есть в дополнение к электронной появляется также и дырочная проводимость. При повышении температуры выше T_c , при которой совершается суперионный ФП и появляется «жидкая» фракция ионов Ag^+ , а электропроводность, помимо электронного и дырочного, дополнительно приобретает ионный характер.

В работе обсуждаются особенности механизма совершения суперионного ФП в условиях легирования Cu.

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации (государственное задание № VRFY-2023-0005).

МАГНЕТОПОЛЕВАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПРОДОЛЬНОГО МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЯ В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ ВИСМУТА ДЛЯ НАБЛЮДЕНИЯ ЭФФЕКТОВ, СВЯЗАННЫХ С ТОПОЛОГИЧЕСКИ НЕТРИВИАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРОЙ

Демидов Е. В.¹

1) РГПУ им. А. И. Герцена, управление научных исследований, e-mail: demidov_evg@mail.ru

Особое место в исследованиях систем пониженной размерности занимают полуметаллы и узкозонные полупроводники – материалы с рекордными значениями длины волны де Бройля носителей заряда, которая характеризует возможность наблюдения когерентных эффектов в твердых телах. Одним из классов таких недавно открытых материалов являются полуметаллы Вейля – кристаллы, поверхностная проводимость которых определяется топологическими свойствами волновых функций в объеме образца. При этом, в отличие от топологических изоляторов, в полуметаллах Вейля валентная зона и зона проводимости касаются друг друга в вейлевских точках [1].

Одним из наглядных проявлений Вейлевского полуметалла должно быть киральная аномалия безмассовых фермионов Вейля. Во многих работах, в частности в работе [2] показано, что эта аномалия в полуметаллах Вейля должна проявляться отрицательным магнетосопротивлением при параллельном направлении электрических и магнитных полей и линейной зависимостью проводимости от величины магнитного поля.

В докладе приведены результаты исследования магнетополевой зависимости продольного магнетосопротивления в тонких пленках висмута различной толщины при низких температурах. Рассматривается вопрос, что отрицательное магнетосопротивление может являться проявлением не только киральной аномалии безмассовых фермионов Вейля, а также ряда других эффектов.

Финансирование: работа выполнена в рамках государственного задания при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации (проект VRFY-2023-0005)

Литература

1. A.A. Burkov. Weyl Metals // Annual Review of Condensed Matter Physics – 2018 – V 9, P. 359-378
2. D. T. Son, B. Z. Spivak, Chiral anomaly and classical negative magnetoresistance of Weyl metals // Phys. Rev. B – 2013. – V. 88, 104412. doi:10.1103/PhysRevB.88.104412.

РАЗРАБОТКА МЕЖАТОМНОГО ПОТЕНЦИАЛА С ПРИМЕНЕНИЕМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ СТРУКТУРЫ Sb_2Te_3

Третьяков Т. М.¹, Степанов Р. С.¹, Колобов А. В.¹

1) РГПУ им. А. И. Герцена, институт физики, e-mail: timtret2014@gmail.com

Теория функционала плотности (DFT) является одним из наиболее точных и широко используемых методов в области вычислительного материаловедения. Однако, несмотря на свою высокую точность, DFT имеет высокую вычислительную стоимость, что затрудняет его применение для крупных систем и динамических задач.

Использование машинного обучения, предлагает эффективное решение ресурсных проблем. Данный подход позволяет существенно ускорить расчеты и увеличить размер моделируемой системы, сохраняя при этом точность на уровне DFT. В данной работе рассматривается применение МТР (Moment Tensor Potentials) [1]. Основная идея метода заключается в представлении межатомных взаимодействий через моментные тензоры, которые описывают симметричные функции атомных координат. Эти тензоры служат основой для построения потенциала. МТР обучается на данных, полученных из DFT-расчетов для различных структурных конфигураций атомов. В процессе обучения модель оптимизирует параметры так, чтобы как можно точнее воспроизводить потенциальные энергии и силы, вычисленные с помощью DFT. Этот метод гибок и масштабируем, применим к различным материалам, включая кристаллы и аморфные структуры, что позволяет моделировать крупные системы и длительные процессы.

В данной работе мы рассчитывали межатомный потенциал Sb_2Te_3 . В качестве входных данных использовалось 2000 конфигураций структуры Sb_2Te_3 , содержащей 180 атомов. Расчеты проводились с использованием программного пакета VASP [2], а последующая генерация МТР осуществлялась с помощью программного комплекса MLIP-2 [3]. Проведено сравнение полученных потенциалов с исходными DFT-данными для оценки их точности.

Финансирование: работа выполнена в рамках государственного задания при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации (проект VRFY-2023-0005)

Литература

1. Shapeev A. V., Multiscale Modeling & Simulation. – 2016. – Т. 14. – №. 3. – С. 1153-1173.
2. Sun G. et al., Journal of Molecular Structure: THEOCHEM. – 2003. – Т. 624. – №. 1-3. – С. 37-45.
3. Podryabinkin E. et al., The Journal of Chemical Physics. – 2023. – Т. 159. – №. 8.

СЕКЦИЯ 2

**ЭЛЕКТРОФИЗИКА И ПРИМЕНЕНИЕ ДИЭЛЕКТРИКОВ И
КОМПОЗИТОВ НА ИХ ОСНОВЕ**

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СЕГНЕТОВОЙ СОЛИ, ДИСПЕРГИРОВАННОЙ В ПОРИСТОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ МАТРИЦЕ ЦЕОЛИТА ТИПА А

Матвеева Т. Г.¹, Иванова М. С.², Соловьёв В. Г.^{3,4}

- 1) Филиал Псковского государственного университета в г. Великие Луки, кафедра технологии машиностроения, e-mail: mtg88@yandex.ru
- 2) Псковский государственный университет, Институт физико-математических наук и информационных технологий, кафедра физики, e-mail: ivanovams@mail.ru
- 3) Псковский государственный университет, Институт физико-математических наук и информационных технологий, кафедра физики, e-mail: vg.solovyov@pskgu.ru
- 4) Военная академия связи им. Маршала Советского Союза С.М. Будённого, кафедра физики, e-mail: solovyev_v55@mail.ru

Физические свойства нанокompозитов (в том числе – полученных матричным методом [1]) представляют большой научный и прикладной интерес. В настоящей работе в диапазоне частот 100 Гц – 100 кГц проведено экспериментальное исследование электрофизических свойств сегнетовой соли, введенной из водного раствора в упорядоченную систему полостей с размерами ~ 1 нм цеолита типа NaA [2]. Обнаружен низкотемпературный сдвиг точки Кюри верхнего сегнетоэлектрического перехода сегнетовой соли (рис. 1).

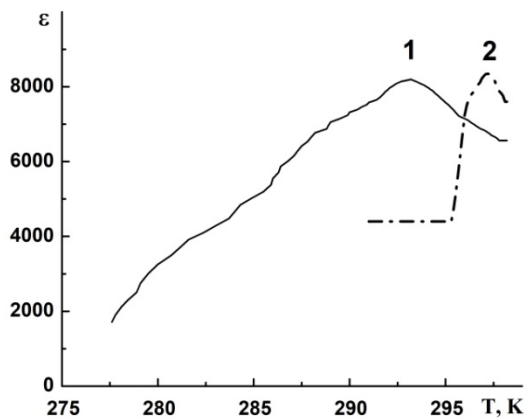


Рис. 1. Температурная зависимость диэлектрической проницаемости сегнетовой соли в матрице цеолита NaA (кривая 1) и объёмного образца сегнетовой соли (кривая 2) [3].

Температурная зависимость проводимости сегнетовой соли, диспергированной в матрице цеолита NaA, также свидетельствует о наличии сегнетоэлектрического фазового перехода в ансамбле наночастиц вещества-«гостя» [4]. При этом существенное влияние на характер температурной зависимости проводимости полученного нанокompозиционного материала оказывают процессы гидратации и дегидратации, роль которых возрастает благодаря взаимодействию наночастиц сегнетоэлектрика с молекулами цеолитной воды.

Литература

1. Богомолов В.Н. Жидкости в ультратонких каналах (Нитяные и кластерные кристаллы) // Успехи физических наук. – 1978. – Т. 124. – № 1. – С. 171–182.
2. Брек Д. Цеолитовые молекулярные сита. М.: Мир, 1976. 781 с.
3. Матвеева Т.Г. Соловьёв В.Г. Диэлектрические свойства наночастиц сегнетовой соли в матрице цеолита NaA // Техника радиосвязи. – 2022. – Вып. 4 (55). – С. 118–124.
4. Матвеева Т.Г., Иванова М.С., Соловьёв В.Г. Изменение характера температурной зависимости электропроводности сегнетовой соли при её диспергировании в матрице цеолита типа А // Вестник Псковского государственного университета. Серия: Естественные и физико-математические науки. – 2024. – Т. 17. – № 1. – С. 106–112.

ЭЛЕКТРЕТНОЕ СОСТОЯНИЕ И СМАЧИВАЕМОСТЬ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ, ОБРАБОТАННЫХ В ТЛЕЮЩЕМ РАЗРЯДЕ ПОСТОЯННОГО ТОКА

Яблоков М. Ю.¹, Кузнецов А. А.¹

*1) Институт синтетических полимерных материалов им. Н.С. Ениколопова РАН, Москва,
e-mail: yabl1@yandex.ru*

Модифицирование полимерных материалов в низкотемпературной плазме приводит к увеличению смачиваемости и адгезии полимеров [1] и появлению электретного состояния. В то же время для всех полимерных материалов в процессе хранения после плазмохимического модифицирования наблюдается эффект восстановления гидрофобности, ухудшение адгезионных свойств и релаксация электретного заряда [2]. Весьма важным является установление причины нестабильности свойств полимеров, обработанных в низкотемпературной плазме. Важным также является стабилизация электретных свойств модифицированных в плазме полимерных материалов [3].

Целью данной работы является изучение влияния электретного состояния, возникающего в пленках политетрафторэтилена (ПТФЭ), обработанных в тлеющем разряде постоянного тока, на гидрофильность этих пленок. В данной работе было изучено изменение угла смачивания водой и эффективной плотности поверхностного заряда при хранении обработанных в плазме образцов ПТФЭ в воздушной среде с различной влажностью. Было показано, что при хранении полимеров в средах с относительной влажностью 1, 33, 75% краевой угол увеличивается, и после примерно 100 часов стабилизируется на уровне ниже угла смачивания не обработанного полимера. Чем выше влажность, тем быстрее и до более высоких значений растет угол смачивания. Было показано, что эффективная плотность поверхностного заряда уменьшается со временем, и тем быстрее, чем выше влажность воздуха. Этот результат соответствует хорошо известному эффекту влияния влажности окружающего воздуха на стабильность электретного заряда [4]. В данной работе представлен механизм увеличения смачиваемости полимеров, обработанных в плазме, как результат накопления электрических зарядов в поверхностном слое. Появление зарядов в пленках ПТФЭ при обработке в плазме может быть связано с образованием свободных фторалкильных и фторпероксидных радикалов. Высокое сродство к электрону данных радикалов дает возможность образования зарядов в поверхностном слое за счет электронов, осаждаемых на поверхность из плазмы. Заряды в поверхностном слое могут локализоваться на дефектах поверхностного слоя, а также на границах аморфной и кристаллических фаз полимера.

Литература

1. Cvelbar U., Walsh J. L., Černák M., et al. White paper on the future of plasma science and technology in plastics and textiles // - Plasma Processes and Polymers (2019) **16**, № 1, p. 1700228.
2. Яблоков М.Ю., Пискарев М.С., Гильман А.Б., Кечекьян А.С., Кузнецов А.А. Взаимосвязь адгезионных, контактных и электретных свойств пленок политетрафторэтилена, модифицированных в разряде постоянного тока. // - Химия высоких энергий (2015) **49**, № 3, с. 235-239.
3. Rychkov D., Yablokov M., Rychkov A. Chemical and physical surface modification of PTFE films – an approach to produce stable electrets. // - Appl. Phys. A. (2012) **107**, № 3, p. 589-596.
4. Mishra A. Studies of polymer electrets. III. Charge decay behavior in polar polymer homoelectrets // - Journal of Applied Polymer Science (1982) **27**, №6, p.1967-1975.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАГРЕВА ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ РАДИОПОГЛОЩАЮЩИХ КОМПОЗИТОВ В СВЧ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ

Сивак А. С.¹, Калганова С. Г.¹, Тригорлый С. В.¹, Кадыкова Ю. А.¹, Сивак Т. П.¹

1) АО «НПП «Контакт» (г. Саратов); e-mail: nayka@kontakt-saratov.ru

Работа посвящена численному моделированию нагрева высокоэнергетических радиопоглощающих композитов (ВРК) в СВЧ-камерах различного типа. Рассматриваются ВРК с заданными размерами, физическими свойствами и различными формами наполнителей. Задачей математического моделирования является определение оптимальной конструкции СВЧ-камеры для реализации функциональных свойств ВРК, связанных с интенсивным выделением тепловой энергии в результате СВЧ-диссипации, а именно с высокой скоростью нагрева более 10 °С/с при градиенте температур в объеме поглощающего наполнителя не более 100 °С. Получены результаты численного моделирования нагрева ВРК в СВЧ-камерах резонаторного (со стоячей волной), волноводного, волноводно-щелевого и квазикоаксиального типа (с бегущей волной) для определения оптимальных конструкций рабочих камер для реализации функциональных свойств ВРК. Установлено, что СВЧ-камера квазиаксиального типа обеспечивает эффективный процесс диссипации СВЧ-энергии при нагреве ВРК с наполнителем в форме тонкого слоя или сферы с высокой скоростью нагрева выше 10 °С /с, максимальной температурой нагрева 635 °С и 1113 °С соответственно за 60 с при минимальном уровне мощности в 300 Вт (рис.1).

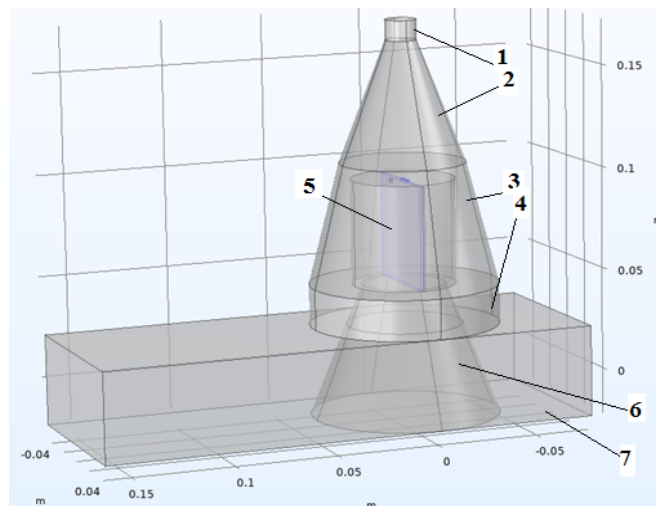


Рисунок 1- Модель экспериментальной СВЧ-камеры на квазикоаксиальном волноводе: 1, 2 – элементы запердельного волновода; 3, 4, 6 – согласующие элементы волноводно-коаксиального перехода; 5 –цилиндрический образец ВРК с тонким слоем поглотителя; 7 – волновод

Разработана конструкция СВЧ-камеры для обеспечения наибольшей напряженности электрического поля E в рабочей камере и максимальной симметрии поля в ее коаксиальной части для эффективного процесса диссипации СВЧ-энергии при нагреве ВРК. Для верификации результатов численного моделирования разработана и изготовлена универсальная блочно-модульная лабораторная СВЧ-установка на частоте 2450 МГц с регулировкой мощности от 0,2 – 3,0 кВт для исследования режимов нагрева на функциональные свойства ВРК. Результаты натурного эксперимента и численного моделирования нагрева ВРК в СВЧ электромагнитном поле показали сходимость с погрешностью 8-15%.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРКОЛЯЦИОННОГО ПРОЦЕССА В КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛАХ С ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЕЙ И УГЛЕРОДНЫМИ НАПОЛНИТЕЛЯМИ

Цобкалло Е. С.¹, Мещерякова Г. П.¹

1) Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна, Санкт-Петербург, ул. Большая Морская д.18, e-mail: mescheryakova.galina@gmail.com

Композитные материалы (КМ) с полимерной матрицей и проводящими наполнителями востребованы промышленностью, поэтому исследование свойств таких КМ является актуальной задачей. Введение в полимерную матрицу проводящих наполнителей нелинейно меняет физические свойства КМ, результат зависит от множества факторов: топологической размерности КМ, вида наполнителя и его геометрии, свойств самой матрицы, в частности степени ее кристалличности, концентрации наполнителя и т. д. Возникающая из первоначально дисперсных частиц наполнителя непрерывная структура – проводящий кластер – является случайным графом и имеет фрактальную размерность несколько меньше топологической размерности образца. При определенной концентрации наполнителя в КМ происходит фазовый переход второго рода диэлектрик – проводник, характеризующийся критической точкой. Экспериментальные исследования представляют собой определенную трудность, поэтому важным является математическое и цифровое моделирование процессов, происходящих при введении в полимерную матрицу проводящего наполнителя. Моделирование позволяет не только делать аппроксимацию экспериментальных данных, интер и экстраполяцию, но также лучше понять внутреннюю структуру КМ и характер её изменения при увеличении концентрации наполнителя или вытяжке.

Цифровое моделирование проводится методами имитационного моделирования. Имитационные модели строятся, как правило, на регулярных решетках. При этом основное внимание уделяется моделированию перколяционных процессов в области точки фазового перехода – точки перколяции. В силу своей специфики, имитационная модель учитывает топологическую размерность КМ, позволяет определить фрактальную размерность проводящего кластера, дать оценку сверху вероятности контакта двух наночастиц, в определенной степени учесть геометрию наполнителя, но учесть, например, степень кристалличности матрицы в этой модели невозможно. К тому же, область перколяционного перехода в имитационных моделях узкая, и для бесконечной решетки в пределе превращается в точку, что не соответствует имеющимся экспериментальным данным.

Экспериментальные данные показывают, что при увеличении концентрации углеродного наполнителя изменение электрического сопротивления в КМ с разными полимерными матрицами носит S-образный характер и аппроксимируются функцией Больцмана, при этом критической точкой является точка перегиба. Этот результат хорошо согласуется с результатами имитационного моделирования на конечных регулярных решетках, где аппроксимирующая функция также имеет S-образный характер и является одним из вариантов функции Больцмана. Но вероятность появления проводимости в узле решетки в разных имитационных моделях близка к 0,5. Экспериментальные данные для невытянутых пленочных нитей с полипропиленовой матрицей и наполнителями: многостенные углеродные нанотрубки и углеродные нановолокна показывают, что проводящие кластеры образуются и при малых концентрациях наполнителя. Имитационная модель лучше всего описывает перколяционный процесс при наполнителе технический углерод, аспектное число которого равно единице. Для наполнителей типа углеродных нанотрубок или волокон аспектное число которых много больше единицы, можно использовать критерий появления связной компоненты, введенный в теории случайных графов Пороговая вероятность возникновения связного кластера в этой модели существенно ниже.

МОДИФИЦИРОВАНИЕ И УЛУЧШЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ НА ОСНОВЕ СОЗДАНИЯ НАНОКОМПОЗИТОВ

Цобкалло Е. С.¹, Москалюк О.А.^{1,2}

- 1) *Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна, Санкт-Петербург, e-mail: tsobkallo@mail.ru*
- 2) *Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта, Калининград.*

Введение в диэлектрическую матрицу наполнителей различного типа позволяет существенно изменять физические свойства материала, а следовательно, и получать материалы с требуемым комплексом функциональных свойств. В настоящее время мировые технологии новых композиционных материалов вышли на наномасштабный уровень в связи с появлением разнообразных по структуре и свойствам уникальных нанонаполнителей. Все полимерные материалы, как правило, являются диэлектриками, т.е. им присуща низкая тепло- и электропроводность.

Для многих применений существует потребность в диэлектрических материалах с пониженным значением коэффициента теплопроводности - порядка 1-10 Вт/м К, т.е. важной научной и технологической задачей является создания теплоотводящих (теплорассеивающих) материалов. Вопросы отвода тепла актуальны для работы компьютеров, электродвигателей, ламп накаливания, светодиодных светильников, нагревательных приборов. Следует отметить, что производство светодиодов и светильников на их основе является наиболее перспективной сферой применения теплорассеивающих полимерных композитов. (ТРПК). В настоящей работе разработаны, созданы и изучены свойства ТРПК, полученных на основе термопластичной полимерной матрицы и нанонаполнителей в виде углеродных наночастиц. В таких материалах коэффициент теплопроводности может быть повышен в десятки раз, что и соответствует задачам теплорассеивания.

Модифицирование свойств диэлектрических материалов в ряде случаев востребовано и в направлении некоторого снижения и их электропроводящих свойств, что необходимо для создания антистатических, экранирующих электромагнитные поля материалов. В настоящей работе варьирование значений электрического сопротивления полимерных материалов достигнуто путем введения в полимерную матрицу различного вида углеродных нанонаполнителей, т. е. путём создания композитных материалов. В полученных материалах значение удельного электрического сопротивления может быть снижено на несколько порядков в зависимости от вида и концентрации наполнителя.

Известно, что введение дисперсных наполнителей в полимерные структуры может приводить к существенному ухудшению их механических свойств, в первую очередь, вызывать падение прочности материалов. В связи с этим, было проведено всестороннее изучение механических свойств, таких как прочность, модуль жёсткости, эластичности разработанных композиционных диэлектриков. Показано, что механические свойства полученных композиционных диэлектриков меняются в допустимых границах. Особо следует отметить, что для некоторых сочетаний диэлектрик-наполнитель наблюдается не только ни падение, но и увеличение прочности материалов, что позволяет создавать материалы с требуемым комплексом тепло- и электропроводящих свойств, обладающих более высокой прочностью. Показано, что введение нанонаполнителей в диэлектрическую матрицу приводит, как правило, к увеличению значения модуля жёсткости полученных в работе композиционных диэлектриков.

Итогом работы следует считать модифицирование и улучшение функциональных свойств полимерных диэлектриков на основе создания нанокompозитов.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАПОЛНЕННЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ.

Крылов А. В.¹, Цобкалло Е. С.¹, Мещерякова Г. П.¹.

1) Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна, Санкт-Петербург, e-mail: Antkrylov@gmail.com.

В настоящее время в промышленности широко используются композиционные материалы, состоящие из полимерной диэлектрической матрицы и проводящих наполнителей таких, как технический углерод, фуллерены, графен, углеродные нанотрубки и нановолокна. Добавлением углеродных наполнителей в разных количествах можно получать материалы с различными теплопроводящими свойствами. Экспериментальный путь решения данной задачи крайне сложным, а эксперименты по исследованию свойств полимерных композитов трудоемки и требуют большого количества дорогостоящего оборудования. Построение же теоретической модели такой сложной многокомпонентной системы, как полимерный композиционный материал, которая предсказала бы зависимость его свойств от состава материала и температуры с достаточно высокой точностью задача весьма сложная. В дополнение к теоретическим и экспериментальным исследованиям уместно применение цифровых моделей, благо существующие программные пакеты и мощность современных компьютеров позволяют проводить подобные исследования.

В среде COMSOL Multiphysics была создана геометрическая модель полимерного диэлектрика с наполнителем из углеродных нановолокон, пригодная для дальнейшего исследования теплофизических свойств.

Для описания ориентации волокон удобно использовать сферическую систему координат, в которой направление оси волокна определяется двумя углами θ и φ , а ось z совпадает с технологическим направлением выработки. С учетом экспериментальных данных распределение волокон по углу θ является нормальным с математическим то ожиданием $\theta_0 = 60^\circ$ и средним квадратичным отклонением $\sigma \sim 10^\circ$. Распределение же по углу φ считаем равномерным. Для построения модели была выбрана полипропиленовая матрица и наполнитель из углеродных нановолокон VGSF-H, концентрация наполнителя принята равной 5% по массе.

Геометрия рассматриваемой модели представляет собой куб (фрагмент полимерной матрицы), внутри которого находятся хаотично ориентированные цилиндры (углеродные нановолокна). Распределение цилиндров в достаточной мере случайно и близко к таковому в реальном композите. В модели можно наблюдать сложные разветвленные структуры, характерные для реальных композиционных полимерных материалов с анизотропными наполнителями.

Имеется схема построения модели, которая позволяет создать аналогичную модель для любой полимерной матрицы и различных видов нановолокон, используемых в качестве наполнителя. Нельзя исключить, что она подходит и исследования композитов с наполнителем из углеродных нанотрубок, хотя данный вопрос, по всей видимости, потребует некоторую модификацию модели.

На основании модели в настоящее время производятся расчеты коэффициента теплопроводности, показывающие, по предварительным результатам, хорошее согласие с данными эксперимента.

Исследование методом диэлектрической спектроскопии процессов переноса заряда в легированных силленитах

Кастро Арата Р. А.¹, Набиуллина Л. А.², Ильинский А. В.³, Шадрин Е. Б.³

- 1) *Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена, Санкт Петербург, Россия, email: recastro@mail.ru*
- 2) *Санкт-Петербургский пожарно-спасательный колледж и центр подготовки спасателей, Санкт-Петербург, Россия, email: lia-nabiullina@yandex.ru*
- 3) *Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН, Санкт Петербург, Россия, email: ilinskiy@mail.ioffe.ru.*

Метод диэлектрической спектроскопии, являясь действенным методом изучения процессов переноса заряда в кристаллических твердых телах, сводится к измерению частотной зависимости комплексного тока $I^*(f)$ через кристаллический образец при приложении к нему внешнего синусоидального переменного напряжения U_0 . Диэлектрические спектры (ДС) представляя собой частотные зависимости действительной $\varepsilon'(f)$ и мнимой $\varepsilon''(f)$ частей комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon^*(f)$, рассчитанной на базе результатов измерения тока $I^*(f)$, способны давать обширную информацию о физических свойствах кристаллов, недоступную иным методам исследования [1]. В последнее время метод диэлектрической спектроскопии приобрел особую популярность благодаря разработке и созданию промышленных диэлектрических спектрометров, обладающих высокой чувствительностью и оснащенных компьютерами с самыми современными программными пакетами обработки результатов.

Целью настоящей работы являлись измерение и интерпретация ДС нелегированных и легированных различными химическими элементами высокоомных ($\rho > 10^8 \Omega \cdot \text{m}$) кристаллов силленитов ($\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$). Цель определена тем, что легирование не только изменяет концентрацию основных носителей заряда и их тип, но и изменяет концентрацию захватывающих носители ловушек, то есть влияет на дрейфовую подвижность носителей заряда [2]. Это приводит к изменению характера и скорости экранирования внешнего электрического поля, что, как показано в настоящей работе, ярко проявляется в ДС.

Измерения выполнены при комнатной температуре в диапазоне частот 10^{-2} - 10^8 Нз. Показано, что обнаруженные особенности ДС обусловлены откликом массива свободных электронов, темновая концентрация которых определена наличием примесей донорного или акцепторного типа. Приведены результаты расчета ДС в рамках теории Дебая, а также в рамках усложненной теории с применением функции $G(\tau)$ распределения чисел релаксаторов по их временам релаксации. Оценены времена релаксации отклика на воздействие зондирующего электрического поля и показано, что они определяются временами максвелловской релаксации носителей заряда. Определены параметры функции $G(\tau)$. Показано, что существенная зависимость времен релаксации от типа примесей обусловлена зависимостью дрейфовой подвижности электронов от параметров ловушек, в присутствии которых происходит перенос заряда.

Литература

1. Ильинский, АВ; Кастро, РА; Набиуллина, ЛА; Пашкевич, МЭ; Шадрин, ЕБ Диэлектрическая спектроскопия как средство диагностики электронных состояний силленитов // НТВ СПбГПУ. Физ-мат.н., (2013), 2, 182 с. 94-100
2. Ilinskiy, AV; Castro, RA; Nabiullina, LA; Pashkevich, ME; Shadrin, EB. Dielectric study of electron capture centers in sillenite crystals $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ // Appl. Mech. Mater., (2016), **835** с. 20-26.

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ ПОЛИМЕРНЫХ МЕМБРАН МФ-4СК (Nafion) С ВКЛЮЧЕНИЯМИ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Лапатин Н. А.¹, Кастро Арата Р. А.¹ Карулина Е. А.²

1) РГПУ им. А. И. Герцена, НИИ физики, nicoljapat@mail.ru

3) РГПУ им. А. И. Герцена, Институт физики, karulina@mail.ru

Целью данной работы явилось выявление особенностей поляризационных процессов и их связь со структурой полимерных материалов типа Nafion с включениями в матрицу мембраны редкоземельных элементов (Tb^{3+} и Eu^{3+}) методом диэлектрической спектроскопии.

Объектом исследования явилась российская мембрана – МФ-4СК (ОАО «Пластполимер»), толщиной 220.0 ± 0.5 мкм и площадью 1-2 см², модифицированная солями редкоземельных металлов путем ионно-обменной сорбции. Измерения диэлектрических спектров (температурно-частотных зависимостей диэлектрических параметров) проводились на спектрометре «Консерт-81» в интервале частот $f=10^0 \dots 10^7$ Гц и температур $T=293K \dots 403K$ (точность 0.5 К). Измерительное напряжение, подаваемое на образец, составляло 1.0 В. Спектры комплексной диэлектрической проницаемости и комплексной проводимости были рассчитаны из спектров импеданса. Относительная погрешность эксперимента и расчета электрофизических параметров исследуемых слоев не превышала 5 %.

В работе были выявлены дисперсия диэлектрической проницаемости и наличие максимумов потерь, свидетельствующих о существовании релаксационных процессов различной природы. Для слоев Nafion характерны значения релаксационных параметров, которые соответствуют симметричному распределению релаксаторов по временам релаксации. При введении примеси металлов тербия и европия в полимерную матрицу было обнаружено изменение спектра релаксаторов, что проявилось в асимметричном характере их распределения. Для всех исследуемых систем обнаружена степенная зависимость удельной проводимости от частоты и разнонаправленное изменение показателя степени с ростом температуры. Данные закономерности свидетельствуют о существовании прыжкового механизма переноса заряда, с переходом от классического механизма проводимости к квантово-механическому механизму при высоких температурах.

Увеличение величины диэлектрической проницаемости и удельной проводимости при легировании слоев Nafion металлами тербием и европием, обусловлены сменой характера поляризационных процессов из-за сильного взаимодействия ионов металлов с матрицей полимера.

Финансирование: работа выполнена в рамках государственного задания при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации (проект № VRFY-2023-0005).

Литература

1. Kenneth A. Mauritz, Robert B. Moore. State of understanding of Nafion // Chem. Rev. 2004. V. 104. № 10. P. 4535-4585.
2. Mayank Pandey, Girish M. Joshi. Effect of DC-bias on electrical properties of polymer/Nafion composites / International Journal of ChemTech Research. Vol.8, No.10 pp 245-248, 2015
3. B.R. Matos. The genuine *ac*-to-*dc* proton conductivity crossover of nafion and polymer dielectric relaxations as a fuel cell polarization loss / Journal of Electroanalytical Chemistry. Volume 871, 15 August 2020, 114357

ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИЙ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА V_2O_5 .

Кондусов А. А.¹, Степанов Р. С.¹, Панина А. М.¹, Колобов А. В.¹, Кононов А. А.¹

1)РГПУ им. А.И. Герцена, институт физики

В последнее время в современной микроэлектронике все больше внимания уделяется дизайну материалов как способу добиться желаемых свойств. Оксиды ванадия (V_xO_y) — это классические «умные функциональные материалы», используемые в широком спектре термохромных, электронных и каталитических приложений.

Исследуемый V_2O_5 имеет орторомбическую кристаллическую структуру, состоящую из зигзагообразных звеньев, которые образуют двойные цепочки [1,2], связанные между собой взаимодействием ван-дер-Ваальса (вдВ). Из-за сильных электрон-электронных корреляций большие кулоновские взаимодействия могут вызывать множество вариантов фазового перехода, таких как переход металл-изолятор (MIT), нетрадиционная сверхпроводимость и квантовая спиновая жидкость [3 - 5]. Ввиду сильной зависимости ширины запрещенной зоны от расстояния между слоями для большинства слоистых материалов [6], представляется возможным тонко настраивать их электронные и оптические свойства путем деформаций.

В исследовании использовался метод первопринципных расчетов DFT, ввиду сильных электрон-электронных корреляций применялся также подход DFT+U. К слоям V_2O_5 прикладывалось осевое (вдоль оси z) и гидростатическое сжатие, что привело к уменьшению ширины запрещенной зоны и значительному изменению оптических свойств. Помимо этого, исследуются деформации, приводящие к теоретическим структурам со значительно отличающимися свойствами.

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации (государственное задание № VRFY-2023-0005).

Литература

1. Sukrit Sucharitakul, etc. V_2O_5 : A 2D van der Waals Oxide with Strong In-plane Electrical and Optical Anisotropy. ACS Applied Materials & Interfaces, 2017, 9(28), 23949.
2. Ashvani Kumar, etc. Structural and optical studies of nanocrystalline V_2O_5 thin films, Thin Solid Films, 2008, 516, 912
3. C. Broholm, etc. Quantum spin liquids, Science, 2020, 367, eaay0668.
4. E. Dagotto, Complexity in Strongly Correlated Electronic Systems, Science, 2005, 309, 257.
5. F. J. Morin, Oxides Which Show a Metal-to-Insulator Transition at the Neel Temperature, Phys. Rev. Lett. 1959, 3, 34.
6. Stepanov R. S., etc. Compositional and Structural Disorder in Two-Dimensional A₃BVI Materials. Crystals, 2023, 13(8), 1209.

ЭЛЕКТРЕТЫ НА ОСНОВЕ КОМПОЗИЦИЙ БИОДЕГРАДИРУЕМЫХ ПОЛИЛАКТИДА И КРАХМАЛА

Галиханов М. Ф.¹, Загидуллина И. А.², Гужова А. А.²

1) *Институт прикладных исследований Академии наук Республики Татарстан, e-mail:*

mgalikhanov@yandex.ru

2) *Казанский национальный исследовательский технологический университет, e-mail:*

zagidullina_inna@mail.ru

Пленочные и волокнистые полимерные короноэлектреты на основе полилактида (ПЛА) вызывают повышенный интерес благодаря возможностям их использования в традиционных и новых областях применения. Это фильтрация газов и жидкостей, преобразование механической энергии в электрическую, генерация электричества из внешней среды (вибрация, энергия ветра, солнца или тепловая энергия), носимая электроника, упаковка пищевых продуктов и медицинских инструментов и т.п. [1]. При этом возрастают требования к экологичности материалов, например, они могут быть биodeградируемыми, как ПЛА.

Однако, короноэлектреты из полилактид имеют низкие величины заряда и малые времена релаксации и жизни [2], т.е. время сохранения электретного состояния этого полимера недостаточно для практического применения. Одним из приемов стабилизации электретного состояния в ПЛА является его наполнение высокодисперсными частицами [3]. Но при этом степень биодеградации материала может понижаться. Задачу можно попробовать решить, используя биодеградируемый наполнитель.

Целью данной работы было получение композитов на основе биодеградируемых полилактида и наполнителя и изучение их электретных свойств.

Для исследований были выбраны полилактид и крахмал. Смешение производили на миксере «Brabender» при 180°C. Образцы в виде плёнок толщиной 0,5 мм изготавливались на прессе при 200°C. Электретирование производили в коронном разряде.

Электретные свойства полилактида и его композиций с крахмалом приведены в таблице.

Композиция	Начальные значения			Значения после 30 суток хранения		
	V _з , кВ	E, кВ/м	σ _{эф} , мкКл/м ²	V _з , кВ	E, кВ/м	σ _{эф} , мкКл/м ²
ПЛА	2,73	170	1,51	0,19	15,1	0,08
ПЛА + 2 % крахмала	3,47	197	1,73	0,17	10,5	0,08
ПЛА + 4 % крахмала	2,81	164	1,45	0,14	10,1	0,07
ПЛА + 6 % крахмала	2,51	145	1,25	0,09	4,8	0,04

Видно, что введение крахмала ухудшает значения электретных свойств полилактида, хотя композиции с 2 или 4 % крахмала лучше поляризуются, чем ненаполненный полимер.

Литература

- Zhang J., Chen G., Bhat G.S., Azari H., Pen H. Electret characteristics of melt-blown polylactic acid fabrics for air filtration application // J. Appl. Polym. Sci. 2019, 136, 48309.
- Urbaniak-Domagala W. Electrical properties of poly lactides // Journal of Electrostatics, 71 (2013) 456-461.
- Guzhova A.A., Galikhanov M.F., Gorokhovatsky Yu.A., Temnov D.E., Fomicheva E.E., Karulina E.A., Yovcheva T.A. Improvement of polylactic acid electret properties by addition of fine barium titanate // Journal of Electrostatics. 2016. V. 79. P. 1-6.

МЕМБРАННЫЕ ПОЛИСУЛЬФОНАМИДНЫЕ ЭЛЕКТРЕТЫ ДЛЯ РАЗДЕЛЕНИЯ ЭМУЛЬСИИ УГЛЕВОДОРОДОВ

Галиханов М. Ф.¹, Шайхиев И. Г.², Дряхлов В. О.²

1) *Институт прикладных исследований Академии наук Республики Татарстан, e-mail:*

mgalikhanov@yandex.ru

2) *Казанский национальный исследовательский технологический университет, e-mail:*

ildars@inbox.ru

Углеводороды (УВ) нефти и продуктов ее переработки представляют собой многочисленную группу химических соединений, имеющие решающую роль для экономики народного хозяйства, а для окружающей природной среды – загрязняющие вещества при их сверхнормативном поступлении, способствующие угнетению живых организмов и деградации экосистем. В этой связи обеспечение техносферной безопасности при обращении с нефтью и нефтепродуктами – приоритетная задача для устойчивого развития общества. Решение заключается в применении современных и экологичных технологий.

На основании вышеизложенного в продолжение работ [1-3] проведены исследования по разделению водомасляной эмульсий (ВМЭ) на основе индустриального масла марки «И20-А» (3%) (и ПАВ «Косинтол 242 – 0,2%») полисульфонамидными (ПСА) мембранами с размером пор 0,1 мкм с целью интенсификации процесса и повышения устойчивости к замасливанью, полимерные фильтры подвергались обработке плазмой коронного разряда в течение 1-5 мин при напряжении 5-35 кВ. Как показано данными таблицы в результате модификации эффективность разделения увеличивалась до ≈90 %, производительность при этом повышалась до 10 раз. Результаты исследования позволяют рекомендовать применение апробированного мембранного метода ультрафильтрации для очистки сточных вод от эмульгированных масел, например, в составе отработанных смазочно-охлаждающих жидкостей или моющих растворов.

Значения ХПК пермеатов (мгО/дм³), полученных при разделении ВМЭ коронообработанными ПСА мембранами с размером пор 0,1 мкм приведены в таблице.

Время коронообработки, τ, мин	Напряжение коронообработки, U, кВ			
	5	15	25	35
1	6480	7020	5040	7020
3	6660	6480	7020	6840
5	5760	6660	4860	7200
Пермеат после разделения эмульсии исходной мембраной	7880			
Исходная эмульсия	31360			

Литература

1. Дряхлов В.О., Шайхиев И.Г., Бонев Б.С. и др. Интенсификация очистки водомасляных эмульсий плазменно-модифицированными полиакрилонитрильными мембранами // Вестник Казанского технологического университета. 2013. Т. 16. № 3. С. 148-150.
2. Дряхлов В.О., Капралова Н.Н., Шайхиев И.Г. и др. Исследование разделения водомасляных эмульсий, стабилизированных пав "Неонол", с помощью плазменно-модифицированных мембран // Вестник Казанского технологического университета. 2011. № 6. С. 31-35.
3. Дряхлов В.О., Шайхиев И.Г., Абдуллин И.Ш. и др. Исследование разделения водомасляных эмульсий с помощью плазменно-модифицированных мембран // Вестник Казанского технологического университета. 2010. № 11. С. 43-48.

ТОПОЛОГИЯ ИЗОПОВЕРХНОСТЕЙ ВАН ДЕР ВААЛЬСА В СЛОИСТЫХ ДИЭЛЕКТРИКАХ

Степанов Р. С.¹, Кононов А. А.², Колобов А. В.^{1,2}

1) *Научно-исследовательский институт физики, Институт физики Российского государственного педагогического университета им. А. И. Герцена*

2) *Кафедра физической электроники, Институт физики Университета им. А. И. Герцена*

При исследовании механизмов формирования и исчезновения щели ван дер Ваальса (вдВ) различных слоистых материалов выявлено, что взаимодействие вдВ перераспределяется по материалу, что определяет возникновение областей нековалентного взаимодействия или переориентацию вдВ щели [1, 2]. Формирование слоистой структуры связано с объединением областей нековалентного взаимодействия в изоповерхность вдВ. Данные результаты открывают возможности для создания слоистых материалов и объясняют механизмы формирования вдВ щели.

Было обнаружено, что вдВ взаимодействие может отличаться в различных материалах не только по величине, но и по топологии изоповерхности. Ключевым фактором в межслоевом взаимодействии большинства материалов являются наблюдаемые в них механизмы поляризации, характеризующиеся величиной диэлектрической проницаемости. Взаимодействия вдВ могут ослабляться в средах с высокой диэлектрической проницаемостью, поскольку такие среды экранируют диполи, уменьшая эффективную силу взаимодействия между молекулами. Поэтому рассмотрение класса диэлектриков является важным этапом исследования, направленного на выявление закономерностей вдВ взаимодействия в слоистых материалах.

В рамках данного исследования проанализированы и исследованы материалы с различными структурными и электронными свойствами: h-BN, BiOCl, V₂O₅, CaI₂, TlF. По результатам исследования рассчитаны закономерности изменения электрофизических свойств при преобразованиях симметрии и проанализированы топологии изоповерхностей вдВ.

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации (государственное задание № VRFY-2023-0005).

Литература

1. Степанов Р. С. Влияние одноосного давления на структурные и электронные свойства двумерных материалов на примере MoTe₂ и Sb₂Te₃ // *Physics of Complex Systems*. – 2024. – Т. 5. – №. 1. – С. 30–38–30–38.
2. Stepanov, R., Gerega, V., Suslov, A., & Kolobov, A. Uniaxial Pressure-Induced 2D–1D Dimensionality Change in GaSe and Related Materials // *Physica Status Solidi (RRL)–Rapid Research Letters*. – 2023. – Т. 17. – №. 8. – С. 2200430.

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АМОРФНЫХ ПЛЕНОК ТРИСУЛЬФИДА МЫШЬЯКА, ПРИГОТОВЛЕННЫХ МЕТОДОМ ЦЕНТРИФУГИРОВАНИЯ РАСТВОРА

Козюхин С. А.¹, Пепеляев Д. В.¹

1) *Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН,
e-mail: sergkoz@jgic.ras.ru*

Аморфные пленки трисульфида мышьяка ($a\text{-As}_2\text{S}_3$) являются одними из самых изученных в истории исследований халькогенидных стеклообразных полупроводников (ХСП), что объясняется сочетанием целого ряда уникальных физико-химических свойств с относительно простой технологией получения тонких пленок и очень низкой кристаллизационной способностью данного состава. Термическое испарение в вакууме (ВТИ) стекла состава As_2S_3 является основной технологией при изготовлении тонких пленок на подложках различного типа, в то же время в последнее время привлекают внимание материаловедов в области ХСП и альтернативные методы, в частности, метод центрифугирования раствора (spin-coating) [1]. В данном исследовании представлены результаты исследования фотолюминесценции (ФЛ) в широком температурном диапазоне аморфных пленок $a\text{-As}_2\text{S}_3$, полученных по данной технологии.

Для изготовления пленок $a\text{-As}_2\text{S}_3$ предварительно синтезированный материал растворяли в растворе бутиламина с массовой долей растворяемого вещества 20% масс. Растворение проходило при комнатной температуре в течение 2 часов и 48 часов. Для сравнения также были приготовлены пленки аналогичного состава методом термического испарения в вакууме. Все изготовленные пленки были охарактеризованы различными методами для определения фазового и элементного состава, а также морфологии пленок. Температурная зависимость ФЛ исследовалась на рамановском спектрометре Sol Instruments Confotec NR500 с облучением CW-лазером ($\lambda=532$ нм, мощность 0,2 мВт). Изменение температуры в диапазоне от 153 до 293 К осуществлялось на управляющем столике Linkam Scientific Instruments LTD THMS600 с охлаждением жидким азотом.

Установлено, что для исходной пленки $a\text{-As}_2\text{S}_3$ (ВТИ) имеются две полосы: одна с центром в районе 740 нм, другая с центром в районе 640-650 нм, при этом наблюдается характерная для ХСП тенденция увеличения интенсивности ФЛ с понижением температуры. При $T_{\text{комн.}}$ интенсивность второй полосы совсем слабая, с ростом температуры она немного растет и становится сравнимой с интенсивностью полосы 740 нм. Спектры ФЛ пленок $a\text{-As}_2\text{S}_3$, изготовленных методом спин-коатинга, демонстрируют полосу с центром 635-640 нм, интенсивность которой растет с понижением температуры. Положение максимума ФЛ практически не меняется, но интенсивность увеличивается примерно в 4 раза, при этом интенсивность эмиссии данных пленок существенно больше по сравнению с пленками ВТИ. С уменьшением температуры интенсивность ФЛ данных пленок монотонно увеличивается.

Финансирование: Работа выполнена в рамках проекта РНФ № 22-19-00035.

Литература

1. F. R. Pranch and D. J. Coyle, in S. F. Kistler and P. M. Schweitzer, eds., Liquid Film Coating, Chapman & Hall, London, 1997.

ОСОБЕННОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ИЗОЛИРОВАННЫХ ПРОВОДОВ ПРИ ЭКСПЛУАТАЦИИ АВТОМОБИЛЬНОГО ТРАНСПОРТА В ВС РФ

Смирнов А. А.¹, Волков М. Н.²

- 1) ФГКВООУ ВО ВА МТО имени генерала армии А.В.Хрулева, (кафедра Общонаучных и общетехнических дисциплин), e-mail: 89119750282smirnov@gmail.com
- 2) ФГКВООУ ВО ВА МТО имени генерала армии А.В.Хрулева, (кафедра Общонаучных и общетехнических дисциплин), e-mail: vtnb9@mail.ru

Целью работы является изучение надежности автомобильных проводов, при эксплуатации техники в экстремальных условиях и при выполнении боевых задач. Исследования проводятся в рамках изучения дисциплины «Электротехника», курсантами 2 курса, в Военной академии материально-технического обеспечения имени генерала армии А.В.Хрулева на Командно-инженерном факультете.

Основная идея заключается в сравнении изолированных проводов автомобилей, эксплуатируемых в различные условия обстановки - влажный климат, высокоширотные районы, пески, снежный покров, покрытия, обработанные солью. Каким образом необходимо обеспечить безопасную работу электрических цепей автомобиля, а также предотвратить короткие замыкания.

Предполагаемые пути решения и рекомендации производятся на основе статистических данных, полученных в ходе войсковой стажировки и практики в Загородном учебном центре Академии. Результаты исследований обсуждаются в ходе научно - практической конференции Военно-научного общества курсантов (ВНОК). Кроме того, используется опыт Богдана Юрьевича Булычева - руководителя Экспедиции РГО «Первая континентальная экспедиция Россия 360» на отечественных трехосных вездеходах «Бурлак».

Литература

1. Буслов В.А. Особенности чтения лекций по электротехнике в военном вузе // Молодой ученый. – 2021. – № 8 (350).- с.44-46.
2. Филяев М.П., Волков М.Н. Инновационные системы и технологии: теория и практика. Сборник научных трудов. Санкт-Петербургский государственный лесотехнический университет имени С.М. Кирова, Санкт-Петербург, 2021.с. 155-161.

ТЕПЛОСТОЙКИЕ КОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ СИЛИКОНА И АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ ЦЕНОСФЕР ДЛЯ КАБЕЛЬНОЙ ИЗОЛЯЦИИ

Сухарева К. В.¹

1) ФГБОУ ВО «РЭУ им. Г.В. Плеханова, Высшая инженерная школа, sukhareva.kv@rea.ru

Изделия из силиконового каучука широко распространены в различных сферах, в том числе в области создания изоляторных элементов для кабельной промышленности. Актуальной задачей создания композитных материалов для кабельной промышленности является поиск новых неорганических наполнителей с целью придания силиконовым резинам свойства керамообразования для получения керамообразующих кабельных резин. Алумосиликатные ценосферы представляют собой сферические частицы от 50 до 150 мкм из стеклокристаллического материала, состоящего преимущественно из оксидов кремния и алюминия, являются побочным продуктом угольных электростанций при производстве электроэнергии и могут являться перспективным наполнителем для создания диэлектриков на основе полимерных композиционных материалов [1].

В данной работе исследуются резиновые смеси на основе силиконового каучука под шифрами 0, 50–10, 50–25, 50–50, 100–10, 100–25, 100–50, 150–10, где первое цифровое обозначение указывает на размер ценосферы в мкм, а второе на концентрация в масс. %.

Одним из ключевых свойств кабельных изоляционных материалов является их долговечность, определяющаяся в том числе стойкостью к термическому старению. Ускоренное старение образцов проводилось в печи для старения резины АО 3000 (MonTech, Германия) в течение 72 часов при температуре 250 °С. Исследование упруго-прочностных свойств проводилось на испытательной машине GOTECH (Турция) при скорости испытания 500 мм/мин (рисунок 1).

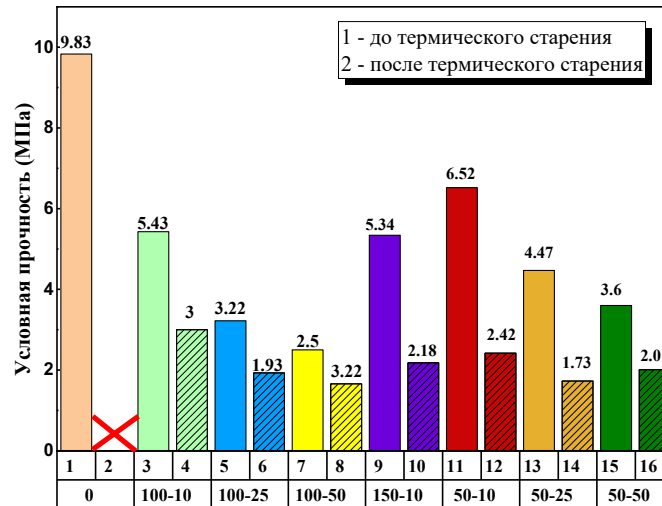


Рисунок 1. Зависимость условной прочности от размера частиц и их концентрации в матрице силиконового каучуку

Образцы, ненаполненные алумосиликатным наполнителем, после стадии старения полностью теряют эластические свойства и хрупко разрушаются. Наполненные силиконовые композиты, не теряя эластических свойств, характеризуется минимальным снижением исходной прочности при большой концентрации наполнителя в матрице.

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке ФГБОУ ВО «РЭУ им. Г.В. Плеханова»

Литература

1. Rybiński, P., Żukowski, W. & Bradło, D. Influence of cenosphere particles on thermal properties composites of silicon rubber// - J Therm Anal Calorim (2015) **122**, p. 1307–1318

ОПТИМИЗАЦИЯ ОПТИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ V_2O_5 ПУТЕМ ЛЕГИРОВАНИЯ ПЕРЕХОДНЫМИ И ПОСТПЕРЕХОДНЫМИ МЕТАЛЛАМИ

Орлов Л. Ю., Дядькина Н. Е., Степанов Р. С., Колобов А. В., Кононов А. А.

Научно-исследовательский институт физики, Российский государственный педагогический университет им. А.И.Герцена, Санкт-Петербург, Россия
e-mail: leonorlov2023@gmail.com

Легирование пентоксида ванадия представляет большой интерес благодаря наличию сильно коррелированных электронов в структуре V_2O_5 . Добавление примесей в пентаоксида ванадия позволяет расширять область практического применения материала. Известно, что на электронные свойства V_2O_5 наиболее существенно влияет длина связей и валентные углы внутри слоя, что отличает его от большинства других слоистых материалов, где электронные свойства определяются расстоянием между слоями [1]. Более того, некоторые примесные ионы могут сдвинуть край поглощения V_2O_5 в более длинноволновую область, что позволит использовать данный материал для улучшения оптических свойств фотодетекторов [2].

Расчеты проводились при помощи вычислительных методов теории функционала плотности (DFT) с функционалом GGA PBE, параметром Хаббарда ($U_d=2$ eV), поправкой Ван-дер-Ваальса (Grimme) и с учётом спин-орбитального взаимодействия. Энергия отсечки была установлена на уровне 830 eV, так как это значение позволяет получить наиболее точные величины межатомных расстояний с минимальными вычислительными затратами.

Исследовались примесные структуры, такие как: $Mo_{1.78}V_2O_5$, $In_{1.78}V_2O_5$, $Y_{1.78}V_2O_5$. Обнаружено, что легирование пентаоксида ванадия данными материалами приводит к смещению края поглощения в более длинноволновую область и к уменьшению величины запрещенной зоны ($E_{BG_{Mo_{1.78}}}=1.778$ eV, $E_{BG_{In_{1.78}}}=1.766$ eV, $E_{BG_{Y_{1.78}}}=1.308$ eV) по сравнению с изначальной структурой, где запрещенная зона составляет 2.118 eV. Также, расчеты показали, что пентоксид ванадия легированный индием или иттрием имеет более плоскую зонную структуру.

Таким образом, легирование пентоксида ванадия переходными и постпереходными металлами позволяет сместить край поглощения в область более длинных волн, уменьшить ширину запрещенной зоны, благодаря появлению энергетических уровней локализованных состояний электронов и "выпрямить" запрещенную зону в следствии чего эффективная масса носителей заряда увеличивается, а следственно увеличивается и эффективная скорость носителей, что можно использовать для улучшения свойств аккумуляторов.

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации (государственное задание № VRFY-2023-0005).

Литература

1. K. Schneider. Optical properties and electronic structure of V_2O_5 , V_2O_3 and VO_2 . J Mater Sci: Mater Electron 31, 10478-10488 (2020).
2. P. Srilakshmi, A. Maheswari, V. Sajeve, M. Sivakumar, Tuning the optical bandgap of V_2O_5 nanoparticales by doping transition metal ions, materials today: proceedings, 1375-1379 (2019).

ДЕФОРМАЦИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ В ТОНКИХ СФЕРОЛИТОВЫХ ПЛЕНКАХ ЦИРКОНАТА-ТИТАНАТА СВИНЦА

Пронин И. П.¹, Старицын М. В.², Каптелов Е. Ю.¹, Сенкевич С. В.¹, Киселев Д. А.³,

Пронин В. П.⁴

- 1) ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Отделение физики диэлектриков и полупроводников, e-mail: Petrovich@mail.ioffe.ru
- 2) ЦНИИ конструкционных материалов «Прометей» им. И.В. Горынина, НИЦ «Курчатовский институт», e-mail: ms_145@mail.ru
- 3) МИСИС, лаборатория физики оксидных сегнетоэлектриков, e-mail: dm.kiselev@misis.ru
- 4) РГПУ им. А.И. Герцена, НИИ физики, e-mail: pronin.v.p@yandex.ru

Высокотемпературный отжиг аморфных пленок цирконата-титаната свинца (ЦТС), предварительно осажденных на платинированную подложку кремния, приводит к кристаллизации фазы перовскита, характеризующейся сферолитовой островковой или блочной радиально-лучистой микроструктурой [1-3]. Отличительной особенностью таких пленок является радиальный разворот (изгиб) кристаллической решетки, связанный с действием двумерных механических напряжений, вызванных изменением плотности пленок при их фазовой трансформации [3-4]. Целью настоящей работы являлась оценка механических напряжений, действующих на тонкие пленки ЦТС со стороны подложки при изменении размеров сферолитовых блоков, и изучение их влияния на диффузию заряженных дефектов по толщине пленок.

Тонкие пленки ЦТС изготавливались двухстадийным методом ВЧ магнетронного распыления керамической мишени. Температура отжига пленок составляла 550-580 °С, толщина - 500-800 nm. Микроструктура исследовалась с использованием растровых электронных микроскопов EVO-40 Zeiss и LIRA 3 Tescan. Пьезоэлектрические измерения проводились методом силовой микроскопии пьезоотлика (Ntegra Prima, NT-MDT). Сегнетоэлектрические свойства изучались с помощью измерителя иммитанса E7-20 и модифицированной схемы Сойлера-Тауэра. Показано, что угол разворота кристаллической решетки линейно связан с площадью сферолитовых блоков. Обнаружен эффект релаксации механических напряжений, связанный с появлением большеугловых незамкнутых границ. Обнаружено немонотонное изменение внутреннего поля и униполярного состояния, предположительно связанного с направленной миграцией заряженных кислородных вакансий. Проводится анализ полученных результатов.

Финансирование: работа поддержана Российским научным фондом, № 24-22-00361.

Литература

1. Spierings G.A.C., Van Zon J.B.A., Larsen P.K., Klee M. Influence of platinum-based electrodes on the microstructure of sol - gel and MOD prepared lead zirconate titanate films // - Integrated Ferroelectrics (1993) **3**. P.283-292.
2. Пронин И.П., Зайцева Н.В., Каптелов Е.Ю., Афанасьев В.П. Оптический контроль однофазности тонких поликристаллических сегнетоэлектрических пленок со структурой перовскита // - Известия РАН, сер. физ. (1997) **61**, №2, с.379-382.
3. Старицын М.В., Пронин В.П., Хинич И.И., Сенкевич С.В., Каптелов Е. Ю., Пронин И.П., Елшин А.С., Мишина Е.Д. Микроструктура сферолитовых тонких пленок цирконата-титаната свинца // - Физика твердого тела (2023) **65**, №8, с.1368-1374.
4. Кукушкин С.А., Тентилова И.Ю., Пронин И.П. Механизм фазового превращения пироклорной фазы в перовскитовую в пленках цирконата-титаната свинца на кремниевых подложках // - Физика твердого тела (2012) **54**, №3, с.571-575.

ИЗМЕНЕНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДИОКСИДА ВАНАДИЯ ПУТЕМ ЛЕГИРОВАНИЯ АЛЮМИНИЕМ И ИНДИЕМ

Дядькина Н. Е.¹, Орлов Л. Ю.¹, Степанов Р. С.¹, Колобов А. В.¹, Кононов А. А.¹

1) *Российский государственный педагогический университет им. А.И.Герцена, Санкт-Петербург, Россия, e-mail: dnadi395@gmail.com*

На данный момент основными направлениями использования VO_2 и других оксидов ванадия в технике являются ИК-болометры, химические и газовые сенсоры, датчики температуры [1]. Исследования, направленные на поиск новых свойств соединения, продолжаются благодаря его уникальной природе, что делает его перспективным материалом для использования в электронных и оптических датчиках, а также в коммутационных устройствах [2, 3]. В частности, его возможность изменения температуры фазового перехода первого рода и способность поглощать ультрафиолетовое излучение делают VO_2 особенно практически значимым. Легирование VO_2 такими примесями как индий и алюминий может расширить температурный диапазон перехода, тем самым улучшая его оптические и электронные свойства. Это делает его ценным инструментом для исследователей и инженеров, стремящихся разработать новые области применения этого материала.

Расчеты проводились с использованием теории функционала плотности (DFT), с использованием обобщенного градиентного приближения (GGA) и обменно-корреляционного функционала PBE с параметрами Хаббарда ($U_d = 5,20$ эВ, $U_p = 0,95$ эВ) [4]. Поправка Ван-дер-Ваальса также учитывалась с использованием метода Grimme. Энергия отсечки была выбрана равной 500 эВ.

Обнаружено, что пятипроцентное легирование алюминием вызывает появление дополнительных энергетических состояний вблизи уровня Ферми, а также незначительное увеличение ширины запрещенной зоны. Легирование 5-ю % индия приводит к более выраженному увеличению запрещенной зоны по сравнению с алюминием.

Легирование алюминием увеличило показатель преломления в видимом и ИК-диапазонах, легирование индием также изменяет показатель преломления, но эти изменения менее значительны. Алюминий в структуре диоксида ванадия создает дополнительные энергетические состояния, повышая вероятность электронных переходов при поглощении, что, как следствие, отражается в увеличении коэффициента поглощения для прямых и непрямых переходов. Согласно расчетам, поглощение увеличивается в ИК-диапазоне, что полезно для применения в сенсорах нового поколения.

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации (государственное задание № VRFY-2023-0005).

Литература

1. Пергамент А. Л., Казакова Е. Л., Артюхин Д. В. и др. // Ученые записки ПетрГУ. 2009. № 7(101). С. 101-105.
2. B. L. Brown, Mark Lee, P. G. Clem, et. al., Journal of Applied Physics 113, 173704(2013)
3. P. Liu, H. Liu., The Innovation, 4(6). (2023)
4. Schneider K. Journal of Materials Science: Materials in Electronics. – 2020. 31.13. – С. 10478-10488.

СВОЙСТВА ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА ТЕЛЛУРИДА ВИСМУТА С ПРИМЕСЬЮ ЖЕЛЕЗА

Кахраманов С. Ш.¹, Абдуллаев Ю. А.¹, Оруджова Х. В.¹, Гасанова Р. А.¹,

Абдуллаев Н.А.^{1,2}

- 1) *Институт физики МНО Азербайджана, AZ1143, Баку, пр. Г.Джавида, 131*
 2) *Бакинский Государственный Университет, AZ1148, Баку, ул. З. Халилова, 23*
e-mail: samir.gahramanov@gmail.com

В топологических изоляторах у электронов приповерхностной области отсутствует обратное рассеяние, и они устойчивы к возмущениям до тех пор, пока возмущения немагнитны, и не нарушается симметрия обращения времени (СОВ) – основной принцип существования этих состояний. Эти устойчивые поверхностные состояния перспективны для использования в электронных устройствах с низким энергопотреблением, в топологических транзисторах, которые могут переключаться электрическим полем, или в устройствах памяти и логических ячейках, управляемых передачей спинового тока. В этих устройствах контакт с магнитными материалами, в данном случае с железом, может нарушить СОВ. Нарушение СОВ переходным металлом может иметь практическое применение, как например, в магнитных топологических изоляторах, использование переноса спинового тока на основе квантового аномального эффекта Холла. Нами были проведены исследования с целью выявления распределения магнитных примесей в матрице слоистых кристаллов халькогенидов висмута и влияние их на электрофизические свойства. Соединение $Bi_2Te_3<Fe>$ получали методом вертикальной направленной кристаллизации при $950^{\circ}K$ и градиенте температуры $\Delta T=100^{\circ}$ и скорости кристаллизации менее 1 см/час. Приготовление поверхности $Bi_2Te_3<Fe>$ осуществлялось путем скола кристаллов вдоль базисной плоскости (0001) на воздухе перед проведением экспериментов. Выявлены факты внедрения атомов Fe в межслоевое пространство, образование ими наноструктур и их воздействие на свойства Bi_2Te_3 . Полученные данные показывают, что атомы Fe не только замещают Bi в матрице кристалла, но и располагаются в ван-дер-ваальсовой щели. Особенностью таких процессов является то, что наночастицы формируются путем последовательных физико-химических процессов, сопровождающиеся изменением их состава и возникновением нанонитей. Влияние железа, обладающего малым атомным радиусом на морфологию межслоевого пространства $Te^{(I)} - Te^{(I)}$, на свойства Bi_2Te_3 и его твердого раствора (Bi_2Te_3 96 моль%- Bi_2Se_3 4 моль%) и $B_{2-x}Fe_xTe_3$ также и оказывает воздействие на механические, термоэлектрические и магнитные свойства. Рентген-дифрактометрические исследования показали наличие на поверхности скола как свободного, так и химически связанного железа $FeTe$. С помощью анализов АСМ-изображений определены функции распределения наночастиц по размерам, анализированы формы, фрактальные размерности границ, распределение наночастиц на поверхности (0001) образца. Поверхность (0001) $Bi_2Te_3<Fe>$ составлена из ряда видов межслоевых наночастиц. Из гистограммы видно, что размеры nanoостровков колеблются в пределах 3-7 нм; наибольшее число частиц имеет высоту порядка $h=7$ нм. Наличие разных групп наночастиц может быть связано с различным временем и температурой их зарождения на дефектной поверхности Bi_2Te_3 и с особенностями процессов кристаллизации на дефектной поверхности (0001).

Термоэлектрические параметры в купе с механической прочностью имели пик в середине процентного состава легирующей примеси железа, дальнейшее увеличение количества железа приводило к резкому снижению обоих параметров. Причем лучшие показатели термоэлектрической добротности наиболее эффективных образцов имели место за счет 12% снижения теплопроводности, из-за рассеяния фононов на границах наночастиц, и увеличения межслоевого расстояния дефектных полостей.

ОСОБЕННОСТИ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ОРГАНИЗАЦИИ НАНОЧАСТИЦ НИТРАТА КАЛИЯ В ПОРИСТОМ СТЕКЛЕ.

Алексеева О. А.¹, Ванина П. Ю.², Горшкова Ю. Е.³, Лукин Е. В.³, Набережнов А. А.¹, Сысоева А. А.¹, Фокин А. В.¹

1) ФТИ им. А.Ф.Иоффе, ОФДП, e-mail: alekseeva.aa@mail.ioffe.ru

2) СПбПУ Петра Великого, ИЭТ, ВИФШ

3) ОИЯИ, ЛНФ им. И.М. Франка

В данной работе были проведены комплексные исследования методом малоуглового рассеяния рентгеновского излучения на установке Xeuss 3.0 и дифракции нейтронов нанокompозитного материала (НКМ) на основе пористого стекла PG7 (средний диаметр пор – 7 ± 2 нм) с внедренным из водного раствора KNO_3 . Целью работы было проследить температурную эволюцию пространственной организации внедренного материала при нагреве и охлаждении. Причем нагрев необходим выше 400 К, т.е. температуры перехода из параэлектрической низкотемпературной α -фазы в высокотемпературную β -фазу. Отличительной особенностью массивного нитрата калия является то, что при охлаждении прямого обратного перехода $\beta \rightarrow \alpha$ не происходит, вместо этого в диапазоне 393 – 378 К возникает метастабильная сегнетоэлектрическая γ -фаза, сохраняющаяся в НКМ PG7+ KNO_3 при охлаждении вплоть до 5 К [1].

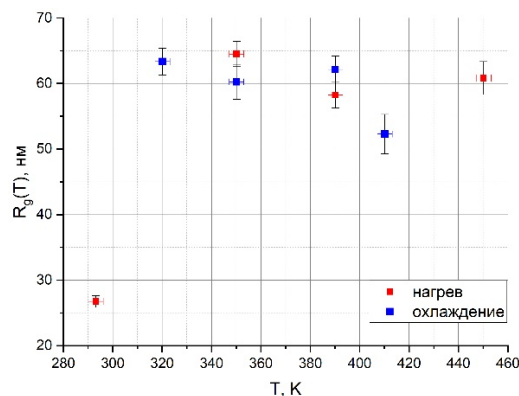


Рис. 1. Температурная эволюция радиуса гирации в области Гинье наночастиц нитрата калия в пористом стекле, полученная при малоугловом рассеянии рентгеновского излучения.

Исходя из полученных данных (Рис.1), можно сделать вывод, что при повышении температуры происходит резкое увеличение размера области, в которой формируются наноагломераты KNO_3 , после чего данный размер остается неизменен. В то же время, дифракционные данные показывают, что размер области когерентного рассеяния (ОКР) составляет 8 ± 2 нм во всем температурном диапазоне. Причиной наблюдаемого эффекта является сосуществование кристаллической и аморфной фазы, причем размер ОКР не зависит от температуры.

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 23-22-00260, <https://rscf.ru/project/23-22-00260/>.

Литература

1. А.А. Набережнов, П.Ю. Ванина, А.А. Сысоева, А. Cizman, Е. Rysiakiewicz-Pasek, А. Noser. Влияние ограниченной геометрии на структуру и фазовые переходы в наночастицах нитрата калия // Физика твердого тела. – 2018. – Т. 60. – №3. – С. 439-442.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОВОДИМОСТИ МЕТАЛЛО-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПЛЕНКИ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ ПРОКАЛИВАНИЯ

Вениаминова Я. О.^{1,2}, Кастро Р. А.¹

- 1) *Российский Государственный Педагогический Университет им. Герцена, Институт Физики, кафедра физической электроники, e-mail: yana.veniaminova@me.com*
 2) *Военная Академия Связи им. Буденного, 9 кафедра физики, e-mail: recastro@mail.ru*

Металлоорганические пасты на основе наночастиц серебра являются многообещающим материалом при использовании для спайки в электронике, в особенности для соединений, подвергающихся большой термической нагрузке. Эволюция структуры и электрических свойств соединений, снова и снова испытывающих сильный нагрев, определяет надежность контактов и, как следствие, качество работы и срок службы электронного компонента. Целью данной работы было исследование электрических свойств проводящей пленки, полученной при различных температурах прокаливания металлоорганической пасты на основе наночастиц серебра.

Синтез и исследование микроструктуры образцов для данного исследования описан в [1]. Коллоидный раствор наночастиц серебра в толуоле был получен химическим восстановлением из AgBF_4 (восстановитель ТВАВН₄). В качестве стабилизирующих агентов использовались гексадециламин и 1-додекантиол. Далее коллоидный раствор в виде капли наносился на подложку (SrTiO_3) и оставлялся до высыхания. После этого полученный образец помещался в печь HFS720E-PB4, где он нагревался со скоростью 10 °С/мин до заданной температуры прокаливания (T_c). Во время нагревания все органические компоненты пленки разрушаются и испаряются. При температурах выше 400 °С остатки органической материи присутствуют в незначительном (по массе) количестве, однако их присутствие может существенно влиять на проводимость образца.

В данной работе изучалась проводимость трех образцов с $T_c = 500$ °С, 600 °С и 700 °С. Для каждого из них была получена зависимость сопротивления от температуры (в диапазоне 5-300 К) с использованием системы PPMS-9Т. Полученные зависимости были исследованы на соответствие следующим моделям проводимости:

- прыжковая проводимость через ближайших соседей: $\rho = \rho_0 e^{A/T}$;
- прыжковая проводимость с переменной длиной прыжка: $\rho = C \exp\{(T_0/T)^{1/1+d}\}$ [2];
- туннельная проводимость: $\rho = \rho_0 \sin(CT)/CT$ [3].

Наиболее заметным результатом исследования стало хорошее соответствие проводимости образца с $T_c = 700$ °С модели туннельной проводимости. При понижении T_c модель перестает работать для низких температур. Обе модели прыжковой проводимости хорошо работают для всех образцов при очень низких температурах (ниже 10 К).

Литература

1. J. Scola, X. Tassart, C. Vilar, F. Jomard, E. Dumas, Y. Veniaminova, P. Boullay. S. Gascoin. Microstructure and electrical resistance evolution during sintering of a Ag nanoparticle paste // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2015. – V. 48.
2. Н.Ф. Мотт, Э.А. Девис. Электронные процессы в некристаллических веществах // М.: Мир – 2-е издание – 1974.
3. R. Stratton. Volt-current characteristics for tunneling through insulating films // J. Phys. Chem. Solids. – 1962. – V. 23 (9)

СЕКЦИЯ 3

СПЕКТРОСКОПИЯ ДИЭЛЕКТРИКОВ

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ В ОКРЕСТНОСТИ ТЕМПЕРАТУРНОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА.

Кузенько Д. В.¹, Спиридонов Н. А.¹, Омелянович С. С.¹

1) ФГБНУ «НИИ «Реактивэлектрон», отдел функциональных материалов, e-mail: danil.kuzenko.84@yandex.ru

Для исследования особенностей поведения диэлектрической проницаемости керамического сегнетоэлектрика BaTiO_3 в окрестности температурного фазового перехода применен метод диэлектрической спектроскопии, проведенный с помощью анализатора иммитанса E7-28. Температурные зависимости действительной ϵ' и мнимой ϵ'' частей комплексной диэлектрической проницаемости позволили определить температурный интервал между минимальным и максимальным значениями диэлектрической проницаемости, обусловленного наличием осциллирующих электрических диполей в параэлектрическом состоянии образца (Рис. 1), с частотной зависимостью вида:

$$\Delta T = c \cdot \ln(f) - d \quad (1)$$

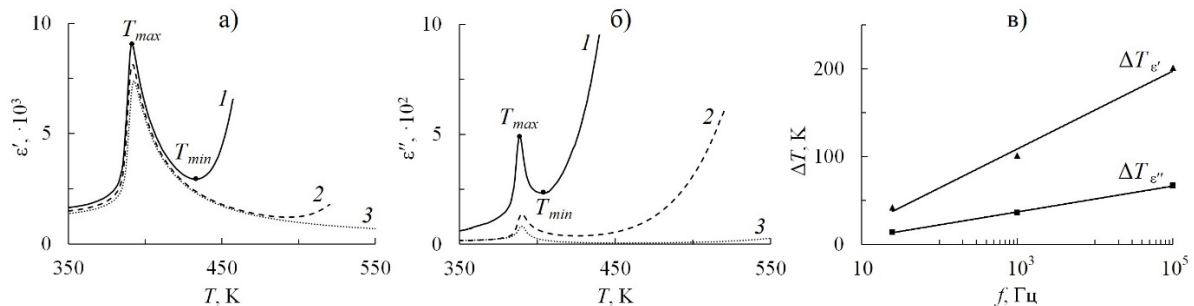


Рис. 1. Температурные зависимости действительной ϵ' (а) и мнимой ϵ'' (б) частей комплексной диэлектрической проницаемости керамического BaTiO_3 , измеренной в электрическом поле напряженностью 1 В/мм на частоте 25 Гц (1), 1 кГц (2), 100 кГц (3), и частотная зависимость температурного интервала $\Delta T = T_{\min} - T_{\max}$ для $\epsilon'(T)$ и $\epsilon''(T)$ (в).

Отмечено также, что при фазовом переходе температура максимума ϵ'' на 3 К ниже температуры максимума ϵ' , что связывается с процессом распада доменной структуры [1].

Температурно-частотная зависимость комплексной диэлектрической проницаемости определяется наличием ее действительной и мнимой частей с учетом их зависимостью от температуры T с энергией активации U [1] и частоты электрического поля f [2]:

$$\epsilon(T, \omega) = \epsilon' - i \cdot \epsilon'' = a \cdot \exp\left(-\frac{U}{kT}\right) + b \cdot f^s \quad (2)$$

Результаты обсуждаются в рамках дисперсионной модели Дебая для комплексной диэлектрической проницаемости с учетом наличия спектра энергий активации осцилляторов Лоренца – дипольных моментов и доменных стенок в сегнетоэлектриках. Также рассматривается подход фрактального диэлектрического отклика в сегнетоэлектриках [3].

Литература

1. Kuzenko D.V. Temperature-activation mechanism of the temperature dependence of the dielectric constant of ferroelectric ceramics PZT // J. Adv. Dielectr. (2022) **12**, No.3, p.2250010.
2. Greičius S., Banys J., Szafraniak-Wiza I. Dielectric investigations of BiFeO_3 ceramics // Process. Appl. Ceram. (2009) **3**, [1-2], p.85–87.
3. Галиярова Н.М. Модели фрактального диэлектрического отклика сегнетоэлектриков с доменными и фазовыми границами // Изв.РАН. Сер. физич. (2004) **68**, №7, с.985–993.

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ ВЫСОКООМНЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

Ильинский А. В.¹, Шадрин Е. Б.¹

*1) Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН, Санкт Петербург, Россия,
email: ilinskiy@mail.ioffe.ru*

Несмотря на то, что исследование процессов переноса заряда и процессов релаксации в высокоомных кристаллах затруднено ввиду малой концентрации свободных носителей заряда, современные диэлектрические спектрометры способны это делать, существенно расширяя возможности подобного рода исследований. Выполненные с их помощью измерения показывают [1], что особенности диэлектрических спектров (ДС) существенно более протяженны по частоте, чем особенности, описываемые распределением Дебая [2], обладающего одним единственным типом релаксаторов, то есть распределением с одним характерным временем релаксации. Причиной указанного уширения является большой разброс параметров, характеризующих условия протекания электрического тока в кристаллических веществах, а именно: разброс значений концентрации носителей тока, наличие нескольких типов оккупирующих носители ловушек, а также связанный с этим разброс численных значений дрейфовой подвижности. Для учета таких моментов в рассмотрение необходимо включать систему с большим числом релаксаторов, обладающих различными временами релаксации.

Целью настоящего доклада является численный анализ особенностей ДС кристаллических веществ, нанесенных на изолирующие подложки, исключающие возможность протекания через них сквозного тока. Поскольку ДС представляют собой частотные зависимости действительной $\varepsilon'(f)$ и мнимой $\varepsilon''(f)$ частей комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon^*(f)$ исследуемого образца, анализ спектров основан на использовании функции распределения числа релаксаторов по их временам релаксации.

Показано, что принципы численного анализа различны для различных типов особенностей ДС. Для анализа особенностей, занимающих узкие частотные диапазоны ($\Delta\omega \leq 1$ порядка величины ω), используется функция Гавриляка-Негами [3]. Для более широких частотных диапазонов ($\Delta\omega \sim 2-3$ порядка) используется усовершенствованная функция Гавриляка-Негами. Для наиболее широких частотных диапазонов, занимаемых особенностями ДС ($\Delta\omega > 3$ порядков), в качестве функции распределения применяется функция частотной зависимости полученной экспериментально мнимой части диэлектрической проницаемости $\varepsilon''(f)$ с последующим ее преобразованием в функцию временной зависимости $\varepsilon''(\tau)$ и корректировкой формы этой функции согласно специальному алгоритму. Результатом численного анализа, допускающего сравнение с экспериментом, являются частотные зависимости $\varepsilon'(f)$ и $\varepsilon''(f)$.

Литература

1. Волков А. С., Копосов Г. Д., Перфильев Р. О. О физическом смысле дисперсионных параметров частотной зависимости диэлектрической проницаемости в модели Гавриляка-Негами // Оптика и спектроскопия. (2018) **125**. №3. с.364–367.
2. Диэлектрические измерения // Физическая энциклопедия. 1. . А – Д. М. Советская энциклопедия, С.700, 1988.
3. Havriliak S., Negami S. // J. Polym. Sci. C. (1966). **14**. p.99

ИССЛЕДОВАНИЕ НИЗКОЧАСТОТНОГО ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ОТКЛИКА В ТВЕРДОМ РАСТВОРЕ МАГНОНИОБАТА СВИНЦА – СКАНДОНИОБАТА СВИНЦА

Молоков А. Ю.¹, Королёва Е. Ю.¹, Вахрушев С. Б.¹

1) ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия, e-mail: molokov.ayu@mail.ioffe.ru

Химический порядок в релаксорах является определяющим фактором, влияющим на нетривиальное неэргодическое поведение релаксоров [1]. В твердых растворах магнониобата свинца – скандониобата свинца (PMN-PSN) увеличение степени химического упорядочения приводит к появлению «нормального» сегнетоэлектрического поведения в исходно релаксорной разупорядоченной системе [2].

Целью данной работы было исследовать диэлектрический отклик монокристалла твердого раствора 0.45PMN-0.55PSN вблизи максимума диэлектрической проницаемости и определить релаксационные процессы, вносящие вклад в низкочастотный диэлектрический отклик. Образец представлял собой тонкую монокристаллическую пластинку твердого раствора 0.45PMN-0.55PSN с напыленными электродами. Измерения проводились на ультраширокополосном диэлектрическом спектрометре Novocontrol BDS80 в диапазоне частот 0,01 Гц – $3 \cdot 10^6$ Гц при температурах 260 – 370 К.

Были получены температурные зависимости диэлектрического отклика 0.45PMN-0.55PSN на разных частотах, из которых видно резкое уменьшение ϵ' и ϵ'' на низкотемпературном плече максимума диэлектрического отклика (~ 293 К). Помимо этого, на $\epsilon''(T)$ было обнаружено немонотонное изменение величины максимума потерь от частоты.

Для выявления релаксационных процессов, вносящих вклад в низкочастотный диэлектрический отклик, были получены спектры ϵ' и ϵ'' на разных температурах. Была проведена нелинейная аппроксимация спектров модельной функцией (1), в которой для описания релаксационных вкладов была использована модельная функция Коула-Коула, представляющая собой однородно уширенную функцию Дебая ($\alpha < 1$):

$$\epsilon^*(\omega) = \epsilon_\infty + \sum_j \frac{\Delta\epsilon_j}{1 + (i\omega\tau_j)^\alpha} \quad (1)$$

где ϵ_∞ - высокочастотная диэлектрическая проницаемость, $\Delta\epsilon = \epsilon_0 - \epsilon_\infty$ сила диэлектрического процесса, ϵ_0 – статическая диэлектрическая проницаемость, τ – характерное время релаксации, α – коэффициент уширения спектра относительно Дебаевского, ω – циклическая частота, j – номер процесса. В данном частотном диапазоне удалось выделить 4 релаксационных процесса. 1 из которых описывается функцией Дебая ($\alpha = 1$), а 3 остальных – функцией Коула-Коула. Для каждого релаксационного процесса были получены температурные зависимости его параметров. Были обнаружены аномалии на температурных зависимостях $\Delta\epsilon$, совпадающие с особенностью диэлектрического отклика при 293 К, а также резкие изменения характерных времен релаксации для соответствующих релаксационных процессов. Для выяснения природы данных процессов необходимо проведение дальнейшего анализа данных зависимостей.

Финансирование: работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №22-12-00328, <https://rscf.ru/en/project/22-12-00328/>.

Литература

1. Pramanick, A., Nayak, S. Perspective on emerging views on microscopic origin of relaxor behavior // J. Mater. Res. – 2021. – V. 36. – PP. 1015–1036.
2. Farber, L., & Davies, P. Influence of Cation Order on the Dielectric Properties of Pb (Mg_{1/3}Nb_{2/3}) O₃–Pb (Sc_{1/2}Nb_{1/2}) O₃ (PMN-PSN) Relaxor Ferroelectrics // J. Am. Ceram. Soc. – 2003. – V. 86. - №. 11. - PP. 1861-1866.

РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ ОБРАЗОВАНИЯ И ВЕРОЯТНОСТЕЙ ТРАНСФОРМАЦИИ НЕКОТОРЫХ СОБСТВЕННЫХ ДЕФЕКТОВ В ГЕКСАГОНАЛЬНОМ НИТРИДЕ БОРА

Янибеков И. И.¹, Петров Ю. В.¹

1) СПбГУ, Физический факультет, кафедра Электроники твердого тела,
e-mail: iskander1331@mail.ru

На сегодняшний день одной из наиболее перспективных областей исследования в физике твердого тела является сфера сверхширокозонных материалов. Они представляют собой перспективный класс материалов с уникальными электронными свойствами, что делает их привлекательными с точки зрения различных технологических приложений, таких как силовая и высокочастотная электроника, а также квантовая криптография, для которой требуются устройства для генерации одиночных фотонов.

Гексагональный нитрид бора (h-BN) - один из материалов, точечные дефекты в котором могут служить однофотонными источниками. В работе [1] предполагается, что ими могут являться дефекты, которые представляют собой комплекс из вакансии азота и антиструктурного дефекта - азот в позиции бора ($N_B V_N$), получение которого возможно посредством последовательного ионного облучения и высокотемпературного отжига. Согласно работе [2], такой дефект может быть создан при облучении h-BN ионами гелия и электронами. В вышеупомянутых работах предполагается трансформация вакансии бора V_B в $N_B V_N$, однако теоретически этот процесс не был описан. Целью данной работы является оценка энергетического барьера для трансформации V_B в $N_B V_N$, а также оценка того, насколько дефект $N_B V_N$ в различных зарядовых состояниях более выгоден в сравнении с V_B .

Для моделирования использовался программный пакет ASE, с помощью которого задавалась модель исследуемой структуры – 4 слоя h-BN из 127 атомов с дефектом. Для расчета полной энергии системы методом функционала плотности использовалась библиотека GPAW. После этого в пакете ASE производилась оптимизация структуры к минимальной энергии системы, рассчитывались электростатические поправки и вычислялись энергии образования дефектов.

В данной работе рассчитываются энергии образования вакансии бора и комплекса $N_B V_N$ в различных зарядовых состояниях. Также оценивается энергетический барьер, вероятность переходов между данными дефектами и температуры отжига. Полученные данные моделирования будут использованы для сравнения с результатами эксперимента в работе [2].

Финансирование: исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 23-22-00067.

Литература

1. Toan Trong Tran, Kerem Bray, Michael J. Ford, Milos Toth and Igor Aharonovich: Quantum emission from hexagonal boron nitride monolayers/Nature Nanotechnology, vol. 11, p. 37-42.
2. Ю.В. Петров, О.А. Гогина, О.Ф. Вывенко, S. Kovalchuk, K. Bolotin: Влияние комбинированного ионного и электронного облучения на полосу люминесценции 2 eV в гексагональном нитриде бора/ Журнал технической физики, 2023, том 93, вып. 7.

ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ГЕКСАГОНАЛЬНОГО НИТРИДА БОРА, ОБЛУЧЕННОГО ИОНАМИ ГЕЛИЯ

Петров Ю. В.¹, Вывенко О. Ф.¹, Гогина О. А.¹, Янибеков И. И.¹, Ковальчук С.², Болотин К.²,
Прокудина М. Г.³, Шевчун А. Ф.³,

1) Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет, кафедра
Электроники твердого тела, e-mail: y.petrov@spbu.ru

2) Свободный университет Берлина, физический факультет, институт экспериментальной
физики

3) Институт физики твердого тела РАН, лаборатория электронной кинетики

Гексагональный нитрид бора (h-BN) является широкозонным материалом, интерес к люминесцентным свойствам которых в последнее время существенно возрос в связи с возможностью создания источников одиночных фотонов на основе внутрицентровых переходов в точечных дефектах [1]. Одним из перспективных методов локального создания таких центров люминесценции является облучение сфокусированным пучком ионов [2]. Данная работа посвящена возможности управления люминесценцией h-BN с помощью локального облучения ионами гелия и электронами.

В работе исследованы тонкие пластинки нитрида бора, которые отщеплялись от монокристаллов, полученных по различным технологиям, и переносились на подложку кремния, или нитрида кремния на кремнии. Толщина получившихся пластинок контролировалась методом атомно-силовой микроскопии. Облучение ионами гелия с энергией 30 кэВ и дозами в диапазоне 10^{13} - 10^{17} см⁻² проводилось локально с использованием гелиевого ионного микроскопа Zeiss Orion. Образцы исследовались методом катодолюминесценции (КЛ) с помощью сканирующего электронного микроскопа Zeiss Supra 40VP, оборудованного спектрометром Gatan MonoCL 3, а также методом спектроскопии комбинационного рассеяния света с помощью спектрометра Bruker Senterra. Энергия образования отдельных дефектов, потенциально играющих роль центров люминесценции, оценивалась из расчетов методом функционала плотности.

Получены спектральные распределения и карты КЛ h-BN, облученного ионами гелия с различными дозами. Показано, что облучение приводит к уменьшению интенсивности полосы, соответствующей межзонным переходам. При этом может наблюдаться как уменьшение, так и немонотонное поведение интенсивности других полос КЛ в зависимости от технологии синтеза исходного h-BN. Последующее облучение электронами позволяет восстановить и даже усилить интенсивность некоторых полос в спектре КЛ. В спектрах комбинационного рассеяния света наблюдается появление дополнительной полосы, обусловленной присутствием ионно-индуцированных дефектов.

Финансирование: исследование выполнено за счет средств гранта Российского научного фонда № 23-22-00067, <https://rscf.ru/project/23-22-00067/>. Экспериментальные результаты получены с использованием оборудования Междисциплинарного ресурсного центра по направлению "Нанотехнологии", а также ресурсного центра "Оптические и лазерные методы исследования вещества" Научного парка СПбГУ.

Литература

1. Castelletto S., Inam F.A., Sato S., Boretti A. Hexagonal boron nitride: a review of the emerging material platform for single-photon sources and the spin-photon interface // Beilstein J. Nanotechnol. (2020) **11**, P. 740–769
2. Liu G., Wu X., Jing P., Cheng Z., Zhan D., Bao Y., Yan J., Xu H., Zhang L., Li B., Liu K., Liu L., Shen D. Single Photon Emitters in Hexagonal Boron Nitride Fabricated by Focused Helium Ion Beam // Advanced Optical Materials (2024) **12**, P.2302083

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ РАСТВОРА АЛЬБУМИНА ЧЕЛОВЕКА В МЕГАГЕРЦОВОМ ДИАПАЗОНЕ

Сальникова Ж. А.¹, Смирнов А. П.¹, Кастро Арата Р. А.¹

*1) Российский государственный педагогический университет имени А.И. Герцена,
институт физики, Санкт-Петербург, Россия, e-mail: jannete90@mail.ru*

Целью работы было определение методом диэлектрической спектроскопии [1] релаксационных параметров 20% раствора альбумина человека [2] в диапазоне частот 1 МГц ÷ 2 ГГц и диапазоне температур 20 ÷ 44 С⁰. Для анализа полученных результатов был использован метод комплексного электрического модуля [3], с помощью которого был обнаружен один релаксационный процесс. При этом на частотных зависимостях мнимой компоненты комплексного электрического модуля M'' наблюдался максимум, который был аппроксимирован уравнением Гаврильяка-Негами для комплексного электрического модуля [4]. Это позволило определить релаксационные параметры α , β , τ_0 данного процесса, а также построить функцию распределения времен релаксаторов $G(\tau)$ и рассчитать энергию активации E_a . Было установлено, что процесс хорошо описывается уравнением Дэвидсона-Коула, применимым к несимметричным релаксационным спектрам [5]. В работе сделаны предположения о том, что возможными кинетическими единицами [6,7] данного процесса являются полярные аминокислотные остатки [8] полипептидной цепи молекулы альбумина, а диссимметрия процесса объясняется их хиральностью [9].

Литература

1. Kremer F., Schonhals A. Broadband Dielectric Spectroscopy. // Berlin Heidelberg, Springer – Verlag, 2003, 730 p.
2. Электронный ресурс. URL: www.albumin.org (дата обращения: 25.07.2024)
3. Сальникова Ж.А., Кононов А.А., Смирнов А.П., Кастро Арата Р.А. Использование метода комплексного электрического модуля для определения релаксационных параметров диэлектриков с высокой электропроводностью. // Physics of Complex Systems. 2022, v. 3, № 1, p. 11 – 20. DOI: [10.33910/2687-153X-2022-3-1-11-20](https://doi.org/10.33910/2687-153X-2022-3-1-11-20).
4. Salnikova Zh.A., Kononov A.A. Derivation of the Havriliak – Negami equation for the complex electrical modulus. // AIP Conference Proceedings **2308**, 030017 (2020); DOI: [10.1063/5.0034028](https://doi.org/10.1063/5.0034028)
5. Гороховатский Ю.А., Карулина Е.А., Темнов Д.Э. Физика полимерных диэлектриков. // СПб, Изд-во РГПУ им. А.И. Герцена, 2013, 124 с.
6. Внутреннее вращение молекул. / Под ред. В.Дж. Орвилл-Томаса. / Пер. с англ. под ред. Ю.А. Пентина. // М.: Мир, 1977, 510 с.
7. Готлиб Ю.Я., Даринский А.А., Светлов Ю.Е. Физическая кинетика макромолекул. // Л.: Химия, 1986, 272 с.
8. Финкельштейн А.В. Физика белковых молекул. // М. – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2014, 424 с.
9. Кизель В.А. Физические причины диссимметрии живых систем. – (Совр. пробл. физики) // М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат.лит., 1985, 120 с.

ВЛИЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩЕГО ОБЛУЧЕНИЯ НА ТЕРМОСТИМУЛИРОВАННЫЕ ТОКИ В ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДЕ

Волгина Е. А.¹, Темнов Д. Э.¹, Пинаева У. В.²

1) РГПУ им. А. И. Герцена, институт физики, кафедра общей и экспериментальной физики,
e-mail: volgina.elena.1999@mail.ru

2) ОИЯИ, Лаборатория ядерных реакций им. Г.Н.Флерова, e-mail: pinaeva@jinr.ru

Методом термостимулированной деполяризации были исследованы пленки поливинилиденфторида фирмы Kureha толщиной 9 мкм, предварительно облученные потоком различных ионов (Ne^{+4} , Xe^{+26} , Bi^{+52}). Интегрированная плотность потока (флюенс) для всех типов ионов составляла 10^9 см^{-2} . Пробеги всех ионов для ПВДФ составляли величину, большую 9 мкм. Энергия ионов Хе и Не составляла 1,2 МэВ/нуклон, ионов Вi – около 3,1 МэВ/нуклон.

На рис.1 представлены спектры токов ТСД, полученные после предварительной поляризации образцов в поле напряженностью 100 В/мм при температуре 20°C.

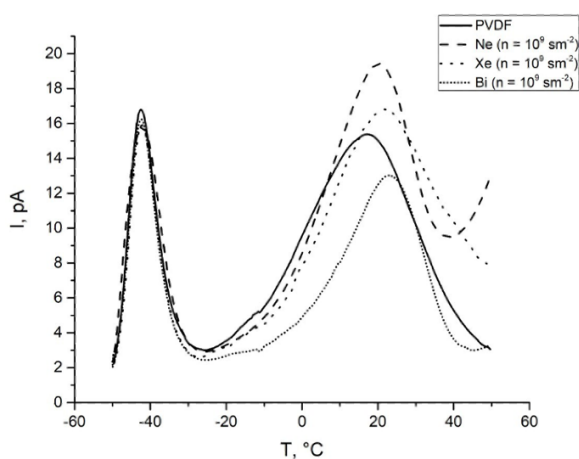


Рис. 1 Токи ТСД пленок ПВДФ без облучения и с облучением различными ионами.

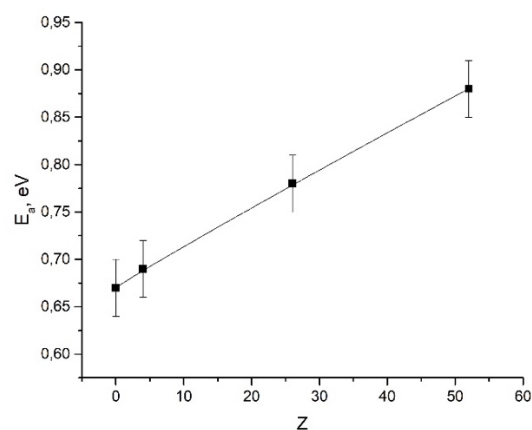


Рис. 2 Зависимость энергии релаксаторов от заряда облучающих ионов

В области температур $-50 - 60^\circ\text{C}$ наблюдаются два релаксационных процесса: при температуре стеклования данного полимера (-40°C) и в районе 20°C , приписываемый обычно α_c -релаксации в данном материале. Температурное положение α_c -пика при увеличении массы и заряда облучающего иона смещается в область более высоких температур, что обусловлено, по всей видимости, ростом удельных ионизационных потерь при увеличении заряда ионов, приводящему к возникновению релаксаторов большей энергии активации. Результаты расчетов энергий активации для всех исследуемых образцов представлены на рис.2

Финансирование: работа выполнена в рамках государственного задания при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации (проект № VRFY-2023-0005).

ВЛИЯНИЕ ПРОЦЕНТНОГО СОДЕРЖАНИЯ СЭВИЛЕНА НА МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНА ВЫСКОГО ДАВЛЕНИЯ

Резцов Т. В.¹, Фомичева Е. Е.², Дземидко И. А.¹

1) РГПУ им. А.И. Герцена, Институт Физики, e-mail: sunnyundeadjuvati@icloud.com

2) ВКА имени А.Ф.Можайского, кафедра физики, e-mail: fee83@yandex.ru

Для некоторых сфер эксплуатации электретных материалов необходим полимер, который будет поддерживать электретное состояние и при этом будет достаточно эластичным. Например, активная упаковка, тактильные устройства управления, датчики импульсных волн и сердцебиения [1]. Для придания полимерам нужных свойств в том числе прибегают к созданию полимер-полимерных структур. Из литературных данных [2] известно, что сополимер этилена с винилацетатом (сэвилен, СЭВА) в смеси с полиэтиленом высокого давления (ПЭВД) позволяет улучшить электретные свойства последнего. Также известно, что сэвилен обладает большей эластичностью по сравнению с полиэтиленом, однако не ясно повлияет ли он на эластичность смеси ПЭВД+СЭВА.

В связи с этим целью данной работы являлось изучение эластичности смеси ПЭВД+СЭВА в зависимости от процентного содержания компонентов смеси.

В качестве образцов были выбраны пленки ПЭВД+СЭВА с различным содержанием сэвилена: 10%, 20% и т.д. Толщина пленок варьировалась от 260 до 350 мкм.

Анализ данных, полученных методом термостимулированной деполяризации (ТСД), позволил выявить тенденцию к смещению процесса дипольно-сегментальной релаксации в область более низких температур с увеличением доли сэвилена в смеси ПЭВД+СЭВА (рис. 1), что в свою очередь позволяет говорить об облегчении подвижности сегментов цепи, ответственных за релаксацию в полиэтилене. Данные предположения подтверждаются полученной зависимостью модуля упругости от содержания СЭВА в смеси (рис. 2).

Таким образом, можно говорить, что смесь ПЭВД+СЭВА обладает лучшей эластичностью, чем ПЭВД, не теряя при этом электретных свойств.

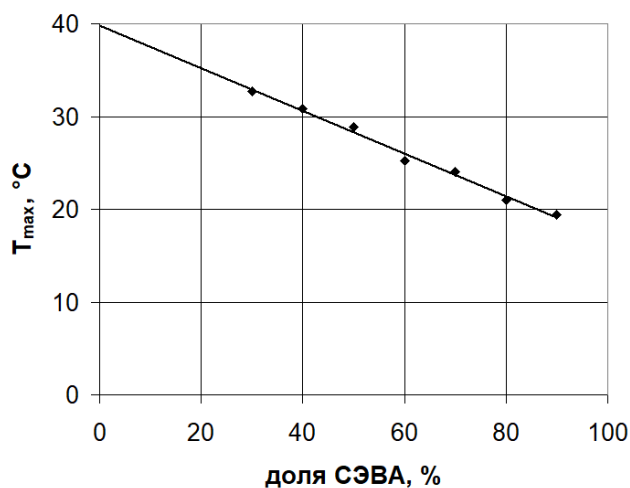


Рисунок 1. Зависимость температурного положения максимума от доли СЭВА.

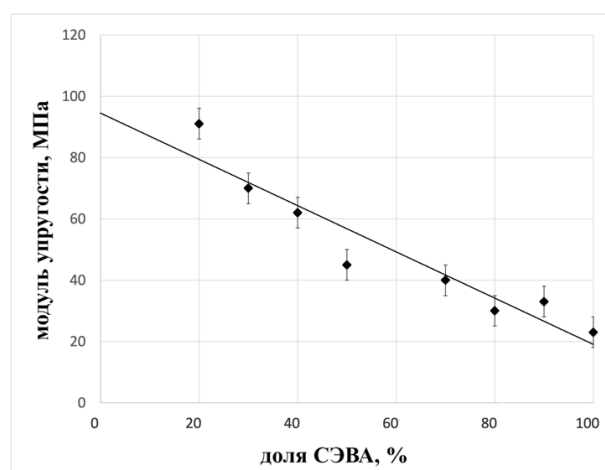


Рисунок 2. Зависимость модуля Юнга от процентного содержания СЭВА.

Литература

- Zhenfeng Guo, Yuvaraj Patil, Akira Shinohara et al. Organic molecular and polymeric electrets toward soft electronics / Molecular Systems Design & Engineering. 2022. Vol. 7. P. 537-552.
- Галиханов М.Ф. Термоактивационная спектроскопия полимерных пленок полиэтилена с сополимером этилена с винилацетатом / М.Ф. Галиханов, Е.А. Карулина, Е.Е. Фомичева, Т.В. Резцов // PHYSICS OF COMPLEX SYSTEMS. – 2023. – 4(2) С. 47-52.

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ В ПЛЕНКАХ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА

Никитина Е. А.¹, Капралова В. М.¹, Симонов А. А.¹, Сударь Н. Т.¹

¹) Санкт-Петербургский Политехнический университет Петра Великого, Институт электроники и телекоммуникаций, e-mail: artemsimonov.2002@mail.ru

Поливиниловый спирт (ПВС) $-(\text{CH}(\text{OH})-\text{CH}_2)_n-$, являющийся водорастворимым термопластичным полимером с хорошими пленкообразующими свойствами, обладает всеми необходимыми характеристиками для использования в качестве диэлектрика затвора в органических полевых транзисторах [1–2]. Работа посвящена изучению релаксационных процессов в пленках ПВС и построению их модели с учетом влияния температуры и проводимости.

Пленки толщиной 30–70 мкм были получены методом полива в лабораторных условиях из 5% водных растворов ПВС. Для изучения диэлектрических характеристик использовался метод диэлектрической спектроскопии в частотном диапазоне 25 Гц–1 МГц при температурах от 294 до 398 К.

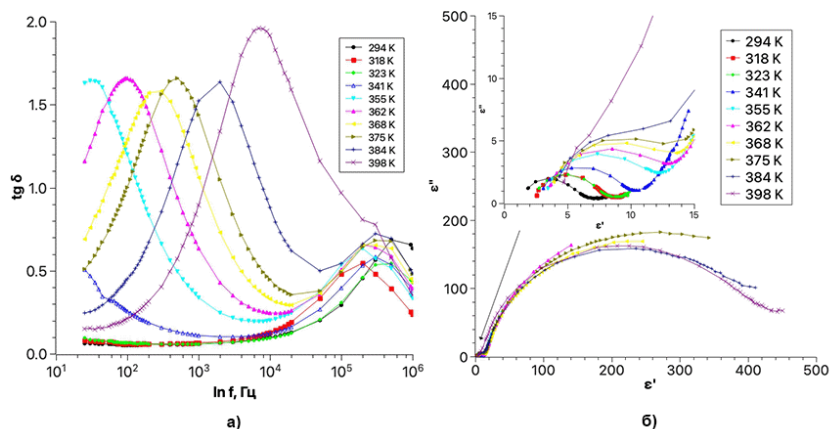


Рис. 1 Частотная зависимость тангенса угла диэлектрических потерь (а), диаграмма Коула-Коула (б) для пленки ПВС толщиной 67 мкм

При низких температурах наблюдается релаксационный пик в высокочастотной области (Рис.1). По мере увеличения температуры в пленках ПВС возрастает проводимость [3]. Особенно заметно это становится при температурах выше температуры стеклования ПВС ($T_c \sim 358$ К). Вместе с этим на диаграмме Коула-Коула появляется ветвь в низкочастотной области, которая при температурах выше T_c маскирует релаксационный пик, относящийся к высокочастотной области. При описании релаксационных процессов в ПВС с применением скорректированной дебаевской формулы следует учитывать влияние проводимости.

Финансирование: работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2023-0016).

Литература

1. Massey R. S., Song X., Prakash R. Direct Printed Flexible Organic Thin Film Transistors with Cross-linked PVA-Carrageenan Gate Dielectric //IEEE Sensors Letters. – 2023.
2. Júnior E. L. P. S., Boudinov H. Optimizing the dielectric characteristics of polyvinyl alcohol for organic electronics //Thin Solid Films. – 2023. – Т. 782. – С. 140034.
3. Nikitina E. A., Kapralova V. M., Sudar N. T. Optical and Electrical Properties of Polymer Nanocomposite Dielectric Based on Polyvinyl Alcohol and Fullerenol $\text{C}_{60}(\text{OH})_{44}$ //2023 International Conference on Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech). – IEEE (2023) – с. 265-267.

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ОПТИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ КРИСТАЛЛОВ TlFeS₂ И TlFeSe₂

Бадалова З. И.¹, Джахангирли З. А.^{1,2}, Ализаде Э. Г.¹, Мамедов Ф. Г.¹, Абдуллаев Н. А.^{1,2}

1) Институт физики МНО Азербайджана, e-mail: zibchik@mail.ru
 2) Бакинский Государственный Университет, e-mail: abnadir@mail.ru

Для магнитных полупроводников характерна сильная взаимосвязь магнитных, электрических и оптических свойств, и магнитное взаимодействие осуществляется с участием электронов проводимости. Методом спектральной эллипсометрии нами экспериментально определены спектральные зависимости действительных и мнимых частей диэлектрической функции и оптической проводимости кристаллов TlFeS₂ и TlFeSe₂. Проведен сравнительный анализ полученных экспериментальных данных с теоретическими расчётами из первых принципов. Ab initio расчеты электронных и оптических свойств проводились на основе DFT с использованием метода полнопотенциальных линейаризованных дополненных плоских волн (FP-LAPW), реализованного в коде Wien2k.

Ниже, на рисунке 1 а и б приведены данные спектральных зависимостей действительных (а) и мнимых (б) частей диэлектрической функции, вычисленных теоретически вдоль кристаллографических направлений x (ϵ_{xx}) и z (ϵ_{zz}), а также определённых экспериментально ϵ_{exp} для кристаллов TlFeS₂. На рисунке 1 с и d приведены данные теоретических вычислений действительной $\text{Re}\sigma$ и мнимой части $\text{Im}\sigma$ оптической проводимости, а также экспериментально определённая оптическая проводимость $\sigma = \sigma_1 + i\sigma_2$, соответственно для кристаллов TlFeS₂ (с) и TlFeSe₂ (d).

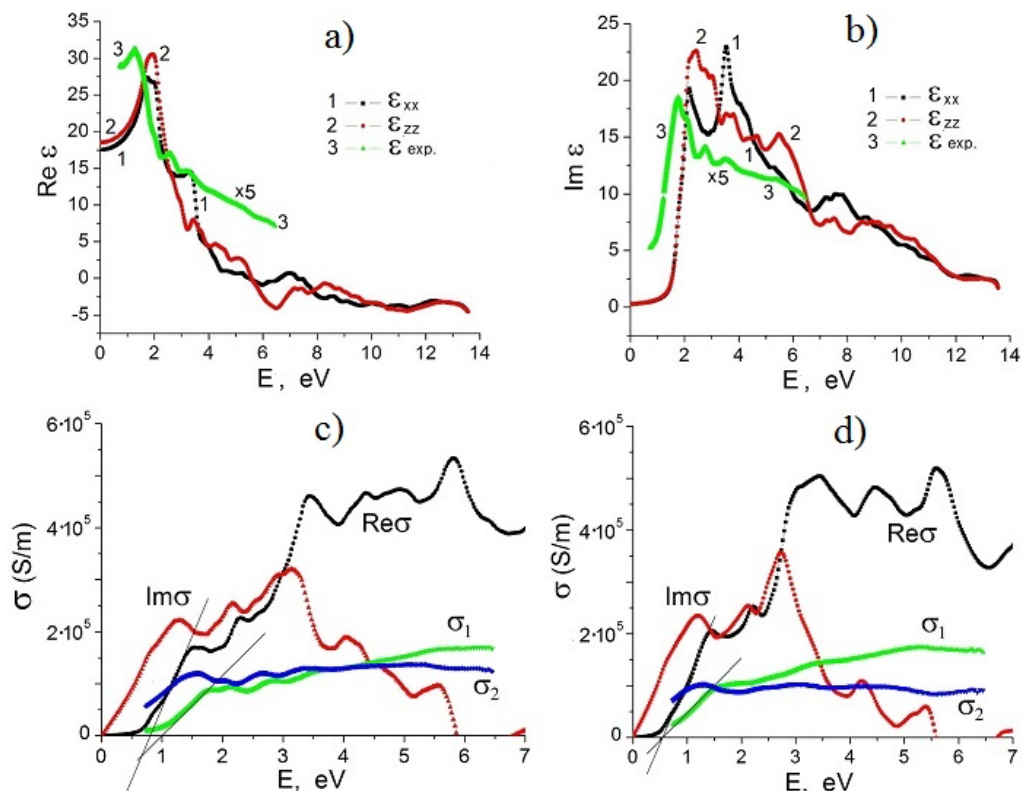


Рисунок 1. Спектральные зависимости действительной $\text{Re}\epsilon$ (а) и мнимой $\text{Im}\epsilon$ (б) частей диэлектрической функции кристаллов TlFeS₂, оптической проводимости кристаллов TlFeS₂ (с) и TlFeSe₂ (d).

Из спектральной зависимости действительных частей оптической проводимости оценена ширина запрещённой зоны кристаллов TlFeS₂ и TlFeSe₂ (рис.1 с и d).

ШИРОКОПОЛОСНАЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МЕРЗЛОЙ ВЛАГОСОДЕРЖАЩЕЙ ДИСПЕРСНОЙ СРЕДЫ С ПРИМЕСЬЮ HNO_3

Волков А. С. ¹

1) Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова, Высшая школа естественных наук и технологий, кафедра фундаментальной и прикладной физики, e-mail: a.s.volkov@narfu.ru

Моделью реальных мерзлых почвогрунтов являются влагосодержащие дисперсные системы (ВДС) на основе порошка мелкозернистого кварца, являющегося диэлектриком, в которых в качестве дисперсной фазы выступает лед с примесями. Электрофизические свойства ВДС с чистым льдом обусловлены ионными (OH^- и H_3O^+) и ориентационными (D^+ и L^-) дефектами [1, 2, 3]. Добавление примеси будет значительно влиять на параметры диэлектрических спектров. Математически частотные зависимости компонент комплексной диэлектрической проницаемости описываются с помощью дисперсионных соотношений, наиболее универсальным из которых является функция распределения Гавриляка-Негами [4]:

$$\varepsilon^* = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_S - \varepsilon_\infty}{[1 + (i\omega\tau_0)^{1-\alpha}]^\beta} \quad (1)$$

В (1) τ_0 – наиболее вероятное время релаксации, α и β – релаксационные параметры, ε_S и ε_∞ – статическая и высокочастотная диэлектрическая проницаемость.

Исследования осуществлялись с помощью диэлектрического спектрометра BDS Novocontrol Concept 80, в частотном диапазоне от 10^{-2} Гц до 1 МГц и диапазоне температур от -120°C до $+10^\circ\text{C}$. В качестве ДС выступал порошок мелкозернистого кварца, дисперсной фазой являлся лед (вода) с примесью азотной кислоты молярными концентрациями 10^{-2} , 10^{-3} , 10^{-4} , 10^{-5} и 10^{-6} М.

На рисунке 1 представлены частотные зависимости действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости образца с примесью HNO_3 концентрацией 10^{-5} М.

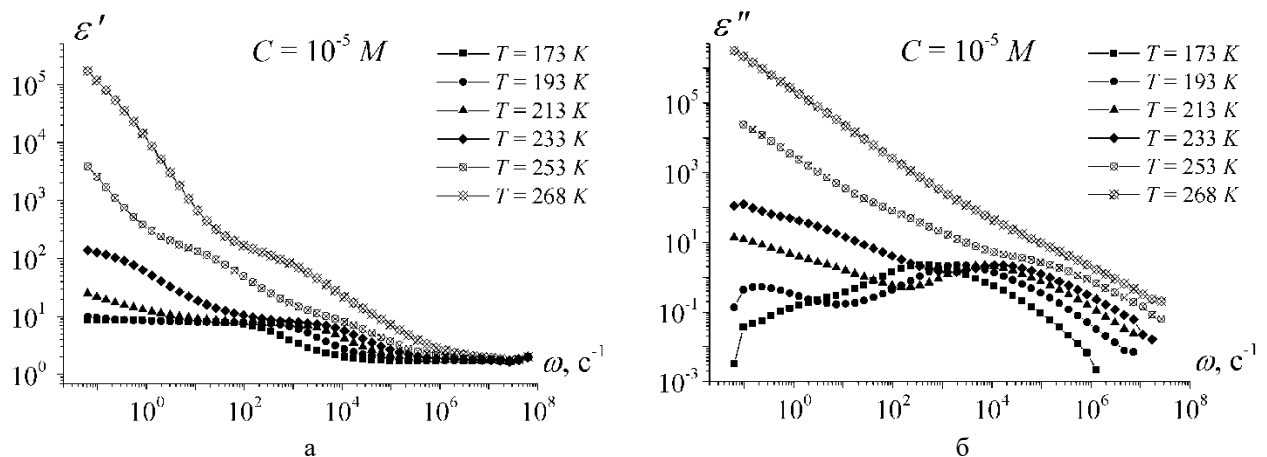


Рисунок 1. Частотные зависимости действительной (а) и мнимой (б) частей комплексной диэлектрической проницаемости образца ВДС с примесью HNO_3 концентрацией 10^{-5} М

Полученные спектры были проанализированы с использованием алгоритмов геометрического и аналитического анализа спектров [5, 6] и процедуры fitting в программном обеспечении OriginPro [7].

В результате определены характеристические параметры дисперсионного соотношения Гавриляка-Негами (1), по температурной зависимости времени релаксации оценена энергия активации. Определенные характеристики являются функцией от концентрации примеси.

На основании анализа экспериментальных результатов предложена следующая модель. В

ВДС электрический ток имеет два пути – по пленке связанной воды и ледяному слою. При этом пленка связанной воды имеет «+» заряд, который появляется как на границе с гранулами дисперсной среды, так и на границе «связанная вода – лед». В то же время инородные атомы будут вытесняться в сторону льда, и тогда избыток отрицательных зарядов расположится на слое межгранульного льда и будет связан с ориентационными дефектами и ионами OH^- . Это означает, что в беспримесном льду будет наблюдаться повышенная концентрация отрицательных носителей. В случае добавления диссоциирующей примеси, ионы примеси при замораживании будут внедряться в кристаллическую решетку льда. H^+ ионы либо увеличивают концентрацию D^+ дефектов, либо ионов H_3O^+ . Отрицательные ионы кислотного остатка NO_3^- окружают положительные D^+ или связанные H_3O^+ ионы.

Литература

1. Тонконогов М.П. Диэлектрическая спектроскопия кристаллов с водородными связями. Протонная релаксация // УФН, 1998, Т. 168, №1. – С. 29-54.
2. Petrenko V.F. Physics of ice / V.F. Petrenko, R.W. Whitworth. New York: Oxford University Press, 2006.
3. Копосов Г.Д., Тягунин А.В. Физика пассивных диэлектриков: учебное пособие – Архангельск: Кира, 2013.
4. Havriliak S., Negami S. A complex plane analysis α -dispersion in some polymer systems // J. Polym. Sci. C, v. 14, 1966. P. 99-117
5. Volkov A.S., Kopusov G.D., Perfil'ev R.O., Tyagunin A.V. Analysis of Experimental Results by the Havriliak-Negami Model in Dielectric Spectroscopy // Optics and Spectroscopy, 2018, Vol. 124, No. 2. – pp. 202-205.
6. Volkov A.S., Kopusov G.D., Perfil'ev R.O. On the Physical Meaning of Disperse Parameters of Frequency Dependence of Dielectric Permittivity in the Havriliak-Negami Model // Optics and Spectroscopy, 2018, vol. 125, №3. – pp. 379-382.
7. Волков А.С. Определение дисперсионных параметров распределения Гавриляка-Негами с помощью компьютерного анализа при многорелаксационных процессах // Физический вестник Высшей школы естественных наук и технологий САФУ. Сб. научн. тр. Вып. 20. – Архангельск: Кира, 2020. – С. 45-57.

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ОПТИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ КРИСТАЛЛОВ CdGa_2S_4 И CdGa_2Se_4

Мамедова И. А.¹, Джахангирли З. А.^{1,2}, Ализаде Э. Г.¹, Бадалов А. А.¹, Мамедов Т. Г.¹,
Абдуллаев Н. А.^{1,2}

1) Институт физики МНО Азербайджана, e-mail: irada_mamedova@yahoo.com

2) Бакинский Государственный Университет, e-mail: abnadir@mail.ru

Кристаллы CdGa_2S_4 и CdGa_2Se_4 обладают особыми свойствами, такими как оптическая анизотропия, двулучепреломление, значительные величины коэффициентов нелинейной восприимчивости, высокая фоточувствительность, яркая люминесценция, что предопределяет их в роли перспективных материалов для оптоэлектроники и нелинейной оптики. Методом спектральной эллипсометрии нами экспериментально определены спектральные зависимости действительных и мнимых частей диэлектрической функции и оптической проводимости кристаллов CdGa_2S_4 и CdGa_2Se_4 . Проведен сравнительный анализ полученных экспериментальных данных с теоретическими расчётами из первых принципов. Ab initio расчеты электронных и оптических свойств проводились на основе DFT с использованием метода полнопотенциальных линейаризованных дополненных плоских волн (FP-LAPW), реализованного в коде Wien2k.

Ниже, на рисунке 1 а и в приведены данные спектральных зависимостей действительных (а) и мнимых (б) частей диэлектрической функции, определённых экспериментально и вычисленных теоретически вдоль тетрагональной оси (||) и перпендикулярно ей (\perp) для кристаллов CdGa_2S_4 . Аналогичные кривые получены для кристаллов CdGa_2Se_4 . На рисунке 1 с и d приведены данные теоретических вычислений действительной $\text{Re}\sigma$ и мнимой части $\text{Im}\sigma$ оптической проводимости, а также экспериментально определённая оптическая проводимость $\sigma = \sigma_1 + i\sigma_2$, соответственно для кристаллов CdGa_2S_4 (с) и CdGa_2Se_4 (d).

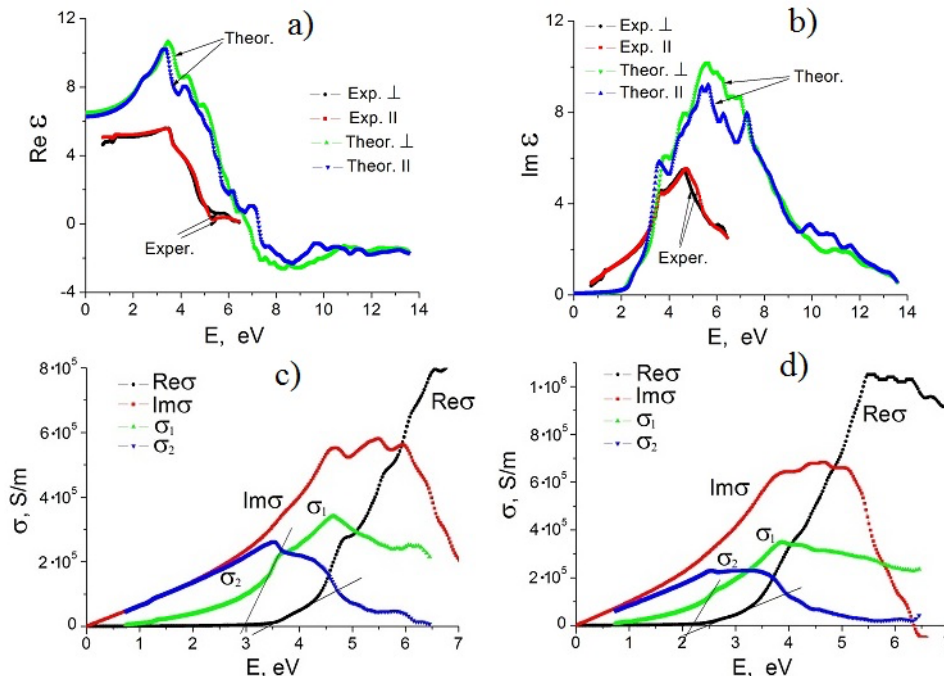


Рисунок 1. Спектральные зависимости действительной $\text{Re}\epsilon$ (а) и мнимой $\text{Im}\epsilon$ (б) частей диэлектрической функции кристаллов CdGa_2S_4 , оптической проводимости кристаллов CdGa_2S_4 (с) и CdGa_2Se_4 (d).

Из спектральной зависимости действительных частей оптической проводимости оценена ширина запрещённой зоны кристаллов CdGa_2S_4 (рис.1 с) и CdGa_2Se_4 (рис.1 d).

ТЕРМОАКТИВАЦИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ КОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА

Карулина Е. А.¹, Кулемина С. М.¹

1) *Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена, факультет физики, кафедра общей и экспериментальной физики, e-mail: karulina@mail.ru*

Широкое применение в промышленности полилактида обусловлено рядом его специфических особенностей, таких как биосовместимость и биоразлагаемость, а также подходящие для практического применения механические и физические свойства этого полимера.

В данной работе исследовались пленки L-полилактида производства Zhejiang Hisun Biomaterials Co.,Ltd и композита на основе данного полимера, наполненных слюдой марки СТО-63. Образцы были изготовлены в Казанском Государственном Технологическом Университете. Исследования проводились методом термостимулированной деполяризации (ТСД) на установке Setaram TSC II (Франция).

Предварительно во всех исследуемых образцах создавалось термоэлектретное состояние при поляризации в поле напряженностью $E_p = 500$ В/мм в течение 5 минут при температурах $T_p = 50^\circ$ и 70° С. Измерение термостимулированных токов деполяризации происходило в режиме линейного нагревания образца со скоростями $\beta = 6^\circ$ и 9° С/мин до температуры 110° С.

При температуре поляризации $T_p = 50^\circ$ ниже температуры стеклования полилактида на кривых ТСД наблюдается один четко выраженный релаксационный процесс в области температур $40^\circ - 50^\circ$ С.

При увеличении температуры поляризации выше температуры стеклования ($T_p = 70^\circ$ С) на температурных зависимостях токов деполяризации в области температур $60^\circ - 70^\circ$ С наблюдается второй пик термостимулированного тока, связанный с размораживанием дипольно-сегментальной подвижности (рис.1).

Внесение наполнителя в матрицу полимера (рис.2) приводит к изменению температурных зависимостей токов деполяризации. На температурных зависимостях токов деполяризации в районе $50^\circ - 60^\circ$ С наблюдается пик ТСД, интенсивность которого возрастает с ростом процентного содержания наполнителя, что может быть связано с поляризацией Максвелла-Вагнера на межфазных границах полимер-наполнитель.

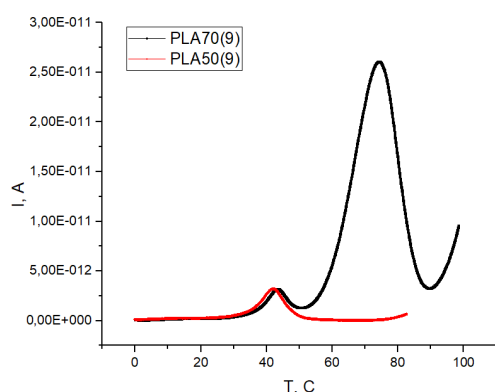


Рис. 1. Температурные зависимости токов деполяризации для исходных пленок полилактида при температурах поляризации 50° С и 70° С и скорости нагревания 9° С/мин.

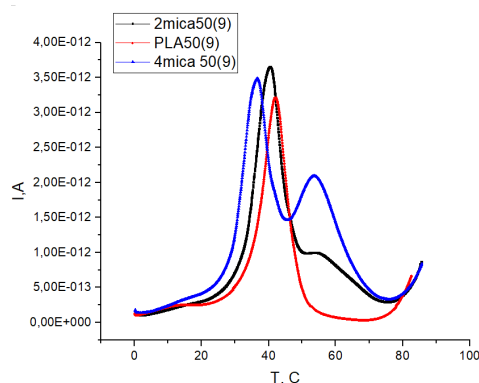


Рис. 2. Температурные зависимости токов деполяризации для исходных пленок, пленок полилактида + 2% слюды, полилактида + 4% слюды, при температуре поляризации 50° С и скорости нагревания 9° С/мин.

Финансирование: Работа выполнена в рамках государственного задания при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации (проект № VRFY-2023-0005).

ВЛИЯНИЕ МОНТМОРИЛЛОНИТА НА СОДЕРЖАНИЕ ВОДЫ В ПОЛИПРОПИЛЕНЕ

Игнатьева Д. А.¹, Карулина Е. А.², Кулемина С. М.², Чистякова О. В.²

1) Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Высшая школа международных образовательных программ, e-mail: ignatyeva.daria92@gmail.com

2) Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена, факультет физики, кафедра общей и экспериментальной физики, e-mail: karulina@mail.ru

В данной работе выполнено сравнительное исследование ИК-спектров пропускания пленок исходного ПП и композита на его основе, модифицированного внедрением в полимерную матрицу монтмориллонита (ММ). Спектры были получены на Фурье-спектрометре ФСМ 1202 в диапазоне волновых чисел 400 – 5000 см^{-1} . Образцы были изготовлены в Казанском Государственном Технологическом Университете.

Монтмориллонит $((\text{Na}, \text{Ca})_{0,33}(\text{Al}, \text{Mg})_2(\text{Si}_4\text{O}_{10})(\text{OH})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O})$ (ММ) является наиболее известным природным минеральным сорбентом, относящимся к подклассу слоистых силикатов (сметитов) с высокой сорбционной активностью. В силу структурных особенностей ММ в межслоевое пространство способны достаточно легко проникать молекулы воды, а сам минерал обладает хорошими сорбционными свойствами.

С введением наполнителя ММ в полимерную матрицу ПП на ИК-спектрах композита (ПП+2%ММ) наблюдаются следующие изменения: усиливается полоса поглощения при 3638 см^{-1} , полоса при 1651 см^{-1} ослабевает и смещается в сторону меньших длин волн (1670 см^{-1}).

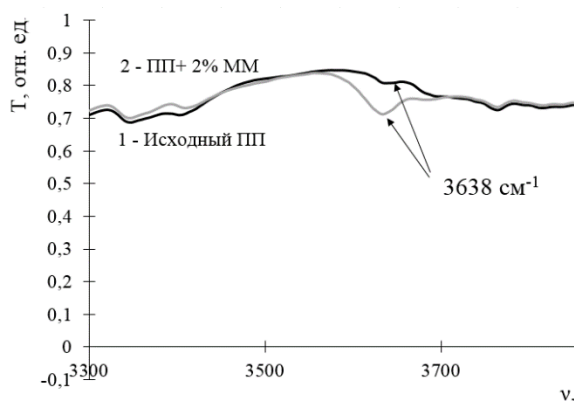


Рис. 1. ИК-спектры пропускания исходного ПП и композита на основе ПП с наполнителем монтмориллонитом (2%) в диапазоне волновых чисел от 3300 см^{-1} до 3900 см^{-1}

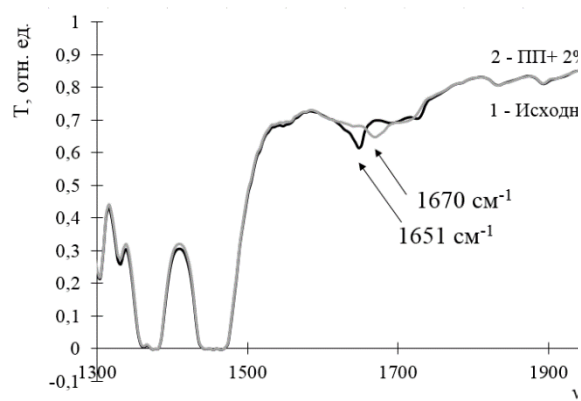


Рис. 2. ИК-спектры пропускания исходного ПП и композита на основе ПП с наполнителем монтмориллонитом (2%) в диапазоне волновых чисел от 1300 см^{-1} до 2000 см^{-1}

Следует отметить, что полосы поглощения в области 3400-3650 см^{-1} и полоса 1634 см^{-1} , описанные в литературе, являются маркерами различных колебаний ОН-групп в ММ. Полученные в работе экспериментальные результаты хорошо коррелируют с этими данными. В области 3638 см^{-1} наблюдается усиление полосы поглощения (рис.1.), которая характеризует ОН-валентное колебание структурных гидроксильных групп в ММ. Усиление полосы, вероятно, связано с тем, что число этих групп в композите увеличивается, другими словами, ММ, введенный в ПП, добавляет «воду» в полимерную матрицу композита. В то же время наблюдается смещение полосы 1651 см^{-1} (исходный ПП) в сторону меньших длин волн (больших энергий) 1670 см^{-1} (рис. 2) и ее ослабление, что может быть связано с изменением структуры композита, т.е. с переходом молекул воды в связанное состояние. Это подтверждается улучшением электростатических свойств композита по сравнению с чистым ПП.

Финансирование: Работа выполнена в рамках государственного задания при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации (проект № VRFY-2023-0005).

СТРУКТУРА БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА АТОМОВ ГЕРМАНИЯ В АМОРФНЫХ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ $(\text{GeTe})_x(\text{Sb}_2\text{Te}_3)$

Марченко А. В.¹, Жаркой А. Б.¹, Лужков А. А.¹, Петрушин Ю. А.¹, Серегин П. П.¹

*1) Российский государственный педагогический университет им. А.И.Герцена,
Институт физики, кафедра физической электроники, e-mail: ppseregin@mail.ru*

Халькогенидные сплавы $(\text{GeTe})_x(\text{Sb}_2\text{Te}_3)$ (где $x = 0.5, 1, 2, 3$) являются перспективными материалами для хранения и кодирования данных в устройствах энергонезависимой памяти.

Кристаллические структуры этих сплавов подробно исследованы [1]. Что касается их аморфных модификаций, то было проведено много исследований с целью определения в них структуры ближнего порядка, однако сравнение всех экспериментальных данных показывает, что эти структуры все еще являются предметом обсуждения [2].

Мессбауэровская спектроскопия (МС) может явиться эффективным инструментом обнаружения изменений в локальном окружении атомов и их электронной структуры при аморфизации сплавов $(\text{GeTe})_x(\text{Sb}_2\text{Te}_3)$. Настоящая работа посвящена исследованию локальной структуры кристаллических и аморфных пленок $\text{Ge}_3\text{Sb}_2\text{Te}_6$, $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$, GeSb_2Te_4 и GeSb_4Te_7 методом абсорбционной и эмиссионной МС на изотопах ^{119}Sn , ^{121}Sb и ^{125}Te .

Рентгеноаморфные пленки (чистые и легированные оловом) толщиной $3 \mu\text{m}$ были получены методом магнетронного распыления поликристаллических мишеней аналогичного состава на постоянном токе в атмосфере азота на подложки из алюминиевой фольги. Затем пленки отжигали в интервале температур $150 - 200^\circ\text{C}$ для получения кристаллических пленок. Для синтезов использовался изотоп ^{119}Sn обогащения 96%.

На основе данных МС на изотопе ^{119}Sn показано, что примесные атомы олова в структуре аморфных пленок изовалентно замещают четырехвалентные атомы германия, образующие тетраэдрическую систему химических связей (локальное координационное число атомов германия в аморфных пленках равно четырем), а в локальном окружении атомов германия находятся преимущественно атомы теллура. Искажения углов между связями атомов германия (олова) с атомами теллура в его ближайшем окружении приводит к уширению спектра за счет неразрешенного квадрупольного расщепления. Флуктуации в расстояниях от атомов германия (олова) до атомов теллура при сохранении тетраэдрической системы химических связей приведет к уширению спектра за счет неоднородного изомерного сдвига.

Данные МС на примесных атомах ^{119}Sn для кристаллических пленок согласуются с результатами рентгеноструктурных исследований - двухвалентное олово замещает двухвалентный германий в ромбоэдрически искаженной решетке типа NaCl. Уширение мессбауэровских спектров кристаллических тройных соединений $(\text{GeTe})_x(\text{Sb}_2\text{Te}_3)$ связано как с искажением решетки, так и с наличием в катионной подрешетке этих соединений большой концентрации стехиометрических вакансий.

На основе мессбауэровских данных на изотопах ^{121}Sb и ^{125}Te сделан вывод о близости локальной структуры как атомов сурьмы, так и теллура в аморфных и кристаллических пленках $(\text{GeTe})_x(\text{Sb}_2\text{Te}_3)$.

Литература

1. C A. Lotnyk, U. Ross, S. Bernuetz, E. Thelander, B. Rauschenbach, Local atomic arrangements and lattice distortions in layered Ge-Sb-Te crystal structures // - Sci. Rep. (2016) **6**. P. 26724.
2. Kolobov A.V., Fons P., Frenkel A.I., Ankudinov A.L., J. Tominga, T. Uruga T. Understanding the phase-change mechanism of rewritable optical media // - Nature Mater. (2004) **3**. 2004. P.703.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ ЦИНКА В ГАЛОГЕНИДАХ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ, СЕРЕБРА И МЕДИ МЕТОДОМ МЕССБАУЭРОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Бордовский Г. А.¹, Марченко А. В.¹, Киселев В. С.¹, Серегин П. П.¹,
Насредин Ф. С.², Доронин В. А.³

- 1) *Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Институт физики, кафедра физической электроники, e-mail: ppseregin@mail.ru*
- 2) *Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Физико-механический институт, кафедра физики*
- 3) *Военно-космическая академия им. А.Ф. Можайского. кафедра физики, e-mail: doroninslava@rambler.ru*

Одним из достоинств мессбауэровской спектроскопии (МС) является возможность определить в одном эксперименте как валентное и координационное состояние атома-зонда, так и симметрию его ближайшего окружения, исходя из величин изомерного сдвига (IS) и квадрупольного расщепления (QS) спектра. Изотоп ^{67}Zn с энергией изомерного перехода 93,3 кэВ представляет в этом отношении особенный интерес - он обладает наименьшей среди всех других изотопов естественной шириной спектральной линии и имеет высокое значение спина его основного состояния, позволяет извлечь из экспериментального спектра полную информацию о тензоре квадрупольного взаимодействия ядра. Обращает на себя внимание малое число материалов, которые были исследованы с помощью МС на ^{67}Zn и тот факт, что большая часть этих работ была выполнена с использованием материнского изотопа ^{67}Ga .

Целью настоящей работы является исследование примесных атомов цинка в кристаллических решетках галогенидов щелочных металлов, серебра и одновалентной меди методом эмиссионной МС на ^{67}Zn с материнским изотопом ^{67}Cu , что расширяет круг объектов мессбауэровской спектроскопии. Второй целью является выяснение применимости эмпирических методов получения информации о центральных, изомерных и доплеровских сдвигах спектров ^{67}Zn , а также интерпретации квадрупольных расщеплений для примесных центров ^{67}Zn в исследованных материалах.

Объектами исследований служили фториды, хлориды, бромиды и иодиды натрия, калия, рубидия и серебра, имеющие кубическую решетку типа каменной соли, а также хлориды, бромиды и иодиды одновалентной меди с решеткой типа сфалерита. Мессбауэровские источники готовились диффузией ^{67}Cu в монокристаллические, либо в прессованные из порошков таблетки соответствующих соединений. Эмиссионные мессбауэровские спектры $^{67}\text{Cu}(^{67}\text{Zn})$ снимались при 4.2 К с поглотителем ZnS .

Спектры всех образцов галогенидов меди представляют собой синглетные линии, соответствующие центрам двухвалентного цинка $^{67}\text{Zn}^{2+}$, тогда как спектры всех образцов галогенидов щелочных металлов и серебра представляют собой квадрупольные триплеты, соответствующие также центрам двухвалентного цинка $^{67}\text{Zn}^{2+}$. Ширина на полувысоте спектров галогенидов составляет от 6 до 8 $\mu\text{m/s}$, это аппаратная ширина спектрометра, она в 20 – 25 раз превышает естественную ширину. Определены центральные, релятивистские доплеровские и изомерные сдвиги эмиссионных мессбауэровских спектров примесных атомов $^{67}\text{Cu}(^{67}\text{Zn})$ в кристаллических решетках галогенидов натрия, калия, рубидия, серебра и одновалентной меди. Проведенный анализ полученных экспериментальных величин продемонстрировал изменение электронной структуры примесных атомов цинка в зависимости от химической природы атомов ближайшего окружения и их координации. На основе сравнения экспериментальных и расчетных величин постоянных квадрупольного взаимодействия для примесных центров цинка в галогенидах щелочных металлов и серебра позволило сделать вывод, что вакансия, образующаяся в результате замещения центрами цинка ионов щелочных металлов, находится в первой координационной сфере катионной подрешетки.

СЕКЦИЯ 4

МЕТОДЫ ИСПЫТАНИЙ И ТЕХНОЛОГИИ ДИЭЛЕКТРИКОВ

ВЛИЯНИЕ ЛОКАЛЬНОГО ОКРУЖЕНИЯ АТОМОВ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛА Na_2SiF_6

Дудка А. П.¹, Каримов Д. Н.¹, Головина Т. Г.¹, Константинова А. Ф.¹

1) *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ “Курчатовский институт”, Москва, e-mail: tatgolovina@mail.ru*

Кристаллы Na_2SiF_6 и кристаллы семейства лангасита $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ имеет одну и ту же пр. гр. ($P321$) и близкие параметры элементарной ячейки [1, 2]. В связи с этим интересно сравнить их структуру и выяснить, что обуславливает разницу в их оптических свойствах. Также целью работы стало изучение температурной эволюции атомной структуры Na_2SiF_6 для поиска структурных аномалий как маркеров появления интересных физических свойств.

Бесцветные прозрачные кристаллы Na_2SiF_6 с поперечными размерами до 5 мм выращены гидротермальным методом. Проведено рентгенодифракционное исследование структуры и расчет оптических свойств кристалла Na_2SiF_6 в диапазоне температур 100–400 К (рис. 1). Из полученных структурных данных с использованием метода молекулярных рефракций [3] и программы WinOptAct [4] рассчитаны температурные зависимости показателей преломления n_o , n_e и вращения плоскости поляризации света в направлении оптической оси ρ . Полученные экспериментальные и расчетные зависимости имеют в целом монотонный характер. Показатели преломления Na_2SiF_6 уменьшаются при повышении температуры (рис. 1б). Получено $\rho > 0$ (рис. 1в), при этом для правого кристалла лангасита $\rho < 0$. Кристалл Na_2SiF_6 оптически отрицательный, лангасит – оптически положительный. Показатели преломления Na_2SiF_6 гораздо меньше показателей преломления лангасита, а величины ρ близки (при $\lambda = 589$ нм для Na_2SiF_6 $\rho = 3.88$, для лангасита $\rho = -3.55$ град/мм).

Мотив структуры $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ и Na_2SiF_6 в значительной степени совпадает. Главные отличия заключаются в координации катионов в позициях $2d$ и $3f$ (в $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ окружение этих позиций тетраэдрическое, а в Na_2SiF_6 – октаэдрическое), а также в уменьшении размера $1a$ -октаэдра при переходе к мелкому катиону Si в Na_2SiF_6 . Оптическая активность лангасита обусловлена наличием спиралей электронной плотности [5]. Изменение в Na_2SiF_6 локального окружения атомов по сравнению с лангаситом нарушает регулярность в строении данных спиралей, что должно ослаблять оптическую активность. С другой стороны, тепловое движение и статическое разупорядочение в Na_2SiF_6 существенно выше, что, наоборот, увеличивает оптическую активность. Конкуренция этих двух факторов оставляет близкими величины ρ для $\text{La}_3\text{Ga}_5\text{SiO}_{14}$ и Na_2SiF_6 .

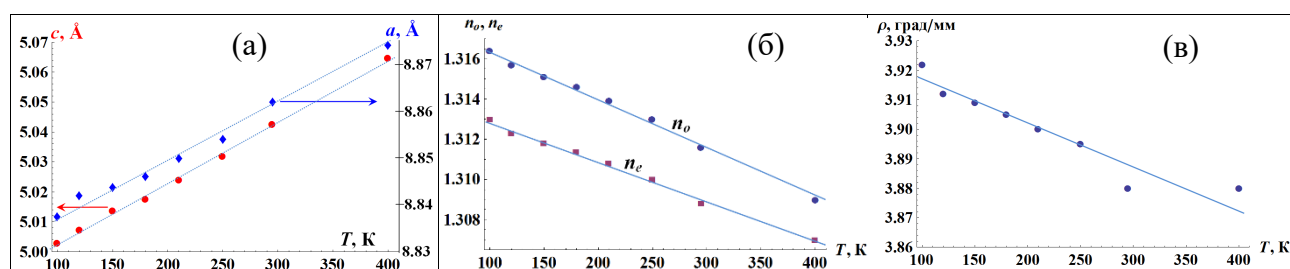


Рис. 1. Температурные зависимости свойств Na_2SiF_6 : а – параметры элементарной ячейки a и c ; б – показатели преломления; в – вращение плоскости поляризации света, $\lambda = 589$ нм.

Литература

1. Zalkin A., Forrester J.D., Templeton D.H. // Acta Cryst. (1964) **17**. P. 1408.
2. Максимов Б.А., Молчанов В.Н., Милль Б.В. и др. // Кристаллография (2005) **50**. С. 813.
3. Бацанов С.С. Структурная рефрактометрия. М.: Высшая школа, 1976. 304 с.
4. Glazer A.M. // J. Appl. Cryst. (2002) **35**. P. 652.
5. Дудка А.П., Милль Б.В. // Кристаллография (2013) **58**. С. 593.

ОЦЕНКА ВРЕМЕНИ ОБРАЗОВАНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ДЕНДРИТОВ В ПОЛИМЕРНОЙ ИЗОЛЯЦИИ

Киселевич В. В.¹

1) Гомель, Белоруссия, Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого, e-mail: valentinkis@list.ru

Длительная эксплуатация полимерной изоляции вызывает образование в её объёме электрических дендритов, дальнейшее развитие которых сопровождается частичными разрядами и, в конечном счёте, приводит к пробое изоляции. Пробой электрической изоляции высоковольтных установок, подвергаемых значительным кратковременным перенапряжениям, нередко происходит уже на стадии зарождения дендритов. По этой причине для надёжного прогнозирования срока службы таких установок важно знать зависимость времени образования дендритов от величины напряжённости электрического поля, приложенного к изоляции. Целью настоящей работы является получение указанной зависимости при помощи математической теории катастроф.

Описание физических систем в теории катастроф выполняют с помощью потенциальных функций $\Phi(x; A)$, определяемых заданным набором переменных состояния x и параметров управления A . Переменные x , характеризующие состояние системы, зависят от подлежащих варьированию управляющих параметров A . Число параметров x , A и, следовательно, вид функции Φ , определяются сложностью рассматриваемой системы.

Время t_{tr} зарождения дендритов главным образом зависит от одного существенного параметра – максимальной локальной напряжённости E_m электрического поля. Поэтому для установления аналитической взаимосвязи между t_{tr} и E_m в первом приближении ограничимся рассмотрением уравнения функции однопараметрической катастрофы складки:

$$\Phi(E_m; \mathcal{V}_{tr}) = E_m^3/3 - a_t \mathcal{V}_{tr} E_m, \quad (1)$$

где E_m – безразмерная напряжённость; a_t – положительный масштабный множитель; \mathcal{V}_{tr} – безразмерная величина, обратная времени t_{tr} зарождения дендритов.

Решая уравнение $\partial\Phi/\partial E_m = 0$ и выражая безразмерные математические параметры E_m и \mathcal{V}_{tr} через размерные физические величины E_m и t_{tr} при помощи соотношений

$$E_m = E_m/E_{th} - 1; \quad \mathcal{V}_{tr} = t_{th}/t_{tr} - 1, \quad (2)$$

получим выражение для оценки времени образования дендритов в полимерной изоляции:

$$t_{tr} = t_{th} / [1 + a_t^{-1} (E_m/E_{th} - 1)^2]. \quad (3)$$

Здесь t_{th} – пороговое время образования дендритов; E_{th} – пороговая напряжённость, по достижении которой в изоляции запускается механизм образования дендритов.

Обработка экспериментальных данных [1] позволила выполнить оценку параметров уравнения (3) для образцов полиэтилена: $a_t = 1,289 \cdot 10^{-4}$; $t_{th} = 5,904 \cdot 10^5$ с; $E_{th} = 400,7$ МВ/м. Определённая нами величина пороговой напряжённости хорошо согласуется с указанным в работе [1] значением E_{th} , равным 400 МВ/м, что подтверждает возможность применения выражения (3) для описания полевой зависимости $t_{tr} = f(E_m)$. Представление уравнения (3) в виде временной зависимости $E_m = f(t_{tr})$ даёт возможность решить довольно часто встречаемую на практике обратную задачу – определить уровень напряжённости электрического поля, исключаяющий появление дендритов в полимерной изоляции на протяжении заданного времени её эксплуатации.

Литература

1. Dissado L.A., Hill R.M. The statistics of electrical tree inception // IEEE Trans. Electr. Insul. (1990) 25, no. 4, p. 660–666.

ЗАВИСИМОСТЬ СОПРОТИВЛЕНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ИЗОЛЯЦИИ ОТ ВРЕМЕНИ СТАРЕНИЯ

Киселевич В. В.¹

1) Гомель, Белоруссия, Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого, e-mail: valentinkis@list.ru

Одним из основных параметров, учитываемых при диагностике силовых кабелей, является активное сопротивление их изоляции. Знание зависимости сопротивления изоляции от времени старения позволяет не только оценивать текущее состояние кабелей, но и решать актуальную задачу прогнозирования их ресурсных характеристик. Поэтому целью данной работы является получение временной зависимости сопротивления электрической изоляции.

Положим, что удельное объёмное сопротивление ρ электрической изоляции обратно пропорционально концентрации x носителей заряда, а зависимость x от времени t определяется дифференциальным уравнением

$$dx = a_{\sigma}(x_{\infty} - x)dt, \quad (1)$$

где dx – увеличение концентрации носителей заряда за малый промежуток времени dt ; a_{σ} – коэффициент пропорциональности; x_{∞} – предельная концентрация носителей заряда при $t \rightarrow \infty$. Тогда, решая уравнение (1) и учитывая пропорциональность $\rho \sim 1/x$, можно записать выражение временной зависимости сопротивления электрической изоляции:

$$\rho(t) = \rho_{\infty} + (\rho_0 - \rho_{\infty}) \cdot \exp(-a_{\rho}t), \quad (2)$$

где ρ_{∞} – установившееся сопротивление изоляции при $t \rightarrow \infty$; ρ_0 – начальное сопротивление изоляции при $t=0$; a_{ρ} – коэффициент, характеризующий скорость снижения сопротивления.

Для проверки уравнения (2) были обработаны данные [1] по ускоренному старению объёмных образцов сшитого полиэтилена марки HFDB-4201 ЕС, используемого для изоляции силовых кабелей напряжением 30 кВ. Параметры уравнения (2), найденные для образцов, подвергавшихся тепловому старению при температуре 140 °С в течение $t=1500$ ч, составили: $\rho_0=1,84 \cdot 10^{11}$ Ом·м; $\rho_{\infty}=0,10 \cdot 10^{11}$ Ом·м; $a_{\rho}=0,31 \cdot 10^{-2}$ ч⁻¹. Степень расхождения δ между опытными данными [1] и теоретической зависимостью (2) не превысила 1,6 %. Малое значение δ позволяет судить о возможности применения уравнения (2) для прогнозирования величины сопротивления изоляции кабелей, работающих в тяжёлых термических условиях.

Наряду с этим большую практическую значимость имеет задача определения ресурсных характеристик изоляции кабелей, эксплуатируемых в нормальных условиях. Для её решения выполнена апробация уравнения (2) применительно к данным по электрическому старению бумажной изоляции кабеля ААБл напряжением 10 кВ, находящегося на балансе Гомельского городского района электрических сетей. Начальное сопротивление изоляции, измеренное в момент ввода кабеля в эксплуатацию ($t=0$), и сопротивление, измеренное при проведении последней диагностики ($t=7,15$ лет), после пересчёта на длину 1 км и температуру 20 °С составили 1049,4 и 513,5 МОм·км, соответственно. Знание этих сопротивлений и нормативного значения (0,5 МОм·км) установившегося сопротивления изоляции, выработавшей свой ресурс, дало возможность определить следующие показатели: коэффициент скорости снижения сопротивления ($1,19 \cdot 10^{-5}$ ч⁻¹), остаточный ресурс (39,87 лет) и относительную степень износа (15,2 %) изоляции на момент проведения последней диагностики кабеля. По результатам оценки ресурсных характеристик бумажной изоляции установлено, что кабель эксплуатируется в благоприятных условиях.

Литература

1. Boukezzi L., Boubakeur A. Effect of thermal aging on the electrical characteristics of XLPE for HV cables // Trans. Electr. Electron. Mater. (2018) **19**, no. 5, p. 344–351.

РОЛЬ ЭЛЕКТРОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПРОБОЕ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК.

Семенов С. Е.^{1,2}, Сударь Н. Т.¹, Пахотин В. А.²

1) СПбПУ Петра Великого, e-mail: sudar53@mail.ru

2) ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, e-mail: v.pakhotin@mail.ioffe.ru

На постоянном и переменном напряжении электролюминесценция (ЭЛ) является следствием релаксации возбужденных состояний, возникающих при электронно-дырочной рекомбинации в объеме (на постоянном напряжении) или в приэлектродных областях (на переменном напряжении) полимера. ЭЛ непосредственно связана с процессами электрического разрушения и пробоя. При воздействии на полимерные диэлектрические пленки коротких импульсов (длительностью не более нескольких сотен наносекунд) реализация такого механизма ЭЛ становится невозможной, поскольку за столь короткое время даже в тонкой полимерной пленке не успеет сформироваться область, где одновременно будут присутствовать электроны и дырки и становится возможной электронно-дырочная рекомбинация. Авторы [1] полагают, что возникновение ЭЛ в импульсном электрическом поле обусловлено ударным возбуждением люминесцентных центров электронами, инжектированными из катода и ускоренными электрическим полем, причем данный процесс наиболее вероятен на переднем фронте импульса. Учитывая, что в сильном электрическом поле вероятность полевой ионизации возбужденных макромолекул становится достаточно высокой [2], ее можно рассматривать как фактор, ускоряющий накопления дырок (положительно заряженных молекулярных ионов) и электронов на переднем фронте электрического импульса [3], т. е. там, где наблюдается ЭЛ и где в большинстве случаев происходит пробой полимерной пленки.

Целью настоящей работы являлось изучение ЭЛ пленок полипропилена (ПП) и полиэтилентерефталата (ПЭТФ) соответственно толщиной 4 и 5 мкм, при воздействии на них высоковольтных электрических импульсов с длительностью переднего фронта ~ 300 нс. С одной стороны исследуемых пленок наносился слой ИТО, а с другой — напылялись алюминиевые электроды диаметром ~ 5 мм. Было установлено, что импульс света всегда возникает на переднем фронте импульса. Его длительность и амплитуда возрастают при увеличении амплитуды импульса напряжения. В поле 500 МВ/м длительность импульса света в ПЭТФ составляет ~ 430 нс, а в ПП ~ 300 нс, причем амплитуда импульса света, регистрируемого в пленке ПЭТФ, была примерно вдвое больше, чем в пленке ПП. Учитывая, что ЭЛ является следствием дезактивация возбужденных состояний, можно полагать, что чем ярче свечение, тем меньше остается возбужденных молекул способных ионизоваться, и, как следствие этого, более высокой будет пробивная напряженность полимерной пленки. Этот вывод согласуется с данными о более высокой импульсной пробивной напряженности пленок ПЭТФ по сравнению с пленками ПП [3].

Финансирование: работа выполнена в рамках Государственного задания на проведение фундаментальных исследований (код темы FSEG-2023-0016).

Литература

1. Kojima K., Takai Y., Ieda M. Electroluminescence in Polyethylene Terephthalate (PET) I. Impulse Voltage // Jap. J. Appl. Phys. (1982), **21**, № 6R, p. 860.
2. Polyansky V. A., Pankrat'eva I. L. On ionization of electronically excited molecules in hydrocarbon combustion under strong electric field // Journal of Electrostatics. (2012), **70**, №. 2, p. 201-206.
3. Семенов, С. Е., Капралова, В. М., Пахотин, В. А., Сударь, Н. Т. Механизм развития импульсного пробоя в полимерных пленках // Физика твердого тела. (2022), **64**, №. 8, с. 948-954.

МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПРЕЛОМЛЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ ВЫСШЕЙ И СРЕДНЕЙ КАТЕГОРИЙ, А ТАКЖЕ СЛОИСТЫХ СТРУКТУР

Касимова В. М.¹, Козлова Н. С.¹, Забелина Е. В.¹

1) *Университет науки и технологий МИСИС, МУИЛ ППМиД «Монокристаллы и заготовки на их основе», e-mail: kasimova.v.m@misis.ru*

Коэффициент преломления является фундаментальным параметром материала, характеризующим взаимодействия света и вещества. Данная оптическая характеристика является определяющей при проектировании оптических систем (например, при проектировании твердотельного лазера). В зависимости от агрегатного состояния материала используются различные, подходящие под требования методы измерения коэффициентов преломления [1]. В данной работе рассматриваются твердотельные диэлектрические материалы (кристаллы высшей и средней категорий), а также слоистые структуры.

Наиболее распространенными методами определения коэффициентов преломления кристаллов являются гониометрические методы, эллипсометрические методы [2]. Однако они имеют свои особенности и ограничения.

Метод измерения коэффициента преломления следует выбирать в зависимости от максимальной погрешности измерения, технической возможности выполнения требований по изготовлению исследуемого образца [3].

В аккредитованной испытательной лаборатории «Монокристаллы и заготовки на их основе» НИТУ МИСИС для определения коэффициентов преломления кристаллов как высшей, так и для средней категории применяются:

– гониометрический метод (метод призмы, метод наименьшего отклонения) с использованием гониометра «ГС-2» в соответствии с ГОСТ 28869-90;

– многоугловой спектрофотометрический метод Брюстера с использованием спектрофотометра «Сару 5000» с универсальной измерительной приставкой «УМА».

Разработан многоугловой спектрофотометрический метод определения коэффициентов преломления для слоистых структур на подложках из монокристаллов [4].

На примере кристаллов $Gd_3Al_2Ga_3O_{12}:Ce$, выращенного в аргоне $La_3Ga_{5,5}Ta_{0,5}O_{14}$ и слоистой структуры $LiNbO_3$ на подложке из монокристаллического кремния в данной работе показаны особенности реализации вышеуказанных методов определения коэффициентов преломления, их точность и требования к исследуемым образцам.

Благодарности

За предоставление образцов авторы выражают благодарность главному научному сотруднику АО «Фомос-Материалы» Бузанову О.А. и работникам кафедры МПид НИТУ МИСИС.

Финансирование: исследования оптических свойств проводились в МУИЛ ППМиД «Монокристаллы и заготовки на их основе» НИТУ МИСИС при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ВУЗам FSME-2023-0003.

Литература

1. Singh Shyam Refractive index measurement and its applications // *Physica Scripta* (2002) **65**, № 2, p.167–180.
2. Palik E.D. Handbook of optical constants of solids // N-Y.: Academic press, 1998. – 3224 p.
3. Забелина Е.В., Козлова Н.С., Гореева Ж.А. и др. Многоугловые спектрофотометрические методы отражения для определения коэффициентов преломления // *ИВУЗ. МЭТ* (2019) **22**, № 3, с. 168–178.
4. Kozlova N.S., Shayapov V.R., Zabelina E.V. et al. Spectrophotometric determination of optical parameters of lithium niobate films // *МОЕМ* (2017) **3**, №. 3, p. 122–126.

ПРИЭЛЕКТРОДНЫЕ ПРОЦЕССЫ В ПОЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Умылин В. Е.¹, Козлова Н. С.¹, Быкова М. Б.¹, Забелина Е. В.¹

1) Университет науки и технологий МИСИС, МУИЛ ППМД «Монокристаллы и заготовки на их основе», e-mail: v.umylin@mail.ru

В настоящее время существует высокая потребность в устройствах, рабочим телом которых являются элементы, изготовленные на полярных срезах кристаллических материалов с нанесенными на них токопроводящими покрытиями. Такие устройства компактны и высоконадежны, однако срок их службы ограничивается, в том числе, в силу процессов деградации и старения поверхностей кристаллических элементов при контакте с токопроводящими покрытиями.

Деградацию, как правило, связывают с внешними воздействиями, которые приводят к значительному отрицательному изменению необходимых свойств. Старение обычно рассматривается в рамках концепции усталости и определяется как самопроизвольное изменение электромеханических свойств со временем даже без приложения внешнего напряжения и при постоянной температуре. Таким образом старение и деградация приводит к ненадежности показаний, передаваемых устройствами и сокращению срока их эксплуатации.

Механизмы старения связаны с дефектами, которые обуславливают перенос заряда, например, собственные дефекты или легирующие примеси. Явление усталости связано с теми же процессами, что и старение, но также с полярными дефектами в объеме, скоплением дефектов заряда на внутренних поверхностях на контакте кристалл-токопроводящее покрытие, а также с температурой и частотой электрического поля. Известно, что токопроводящее покрытие может сильно влиять на диэлектрические свойства и даже на фазовую стабильность материала. Как правило, рассмотрение вклада токопроводящих покрытий в усталостные эффекты и старение обычно ограничивается такими процессами, как расслаивание токопроводящих покрытий, изменение их микроструктуры или геометрических параметров. Однако, наблюдаются и другие явления.

В нашей лаборатории проводятся многолетние исследования особенностей протекания приэлектродных процессов в полярных диэлектрических кристаллах. Целью работ является изучение приэлектродных процессов на поверхностях полярных диэлектрических кристаллов с различными материалами токопроводящих покрытий.

В данной работе мы представляем результаты исследований приэлектродных процессов в трех группах пьезоэлектрических материалов полярной и полярно-нейтральных групп:

- модельный материал – α -LiIO₃;
- низкотемпературные сегнетоэлектрики – NaKC₄H₄O₆·4H₂O (сегнетова соль), (CH₂·NH₂·COOH)₃·H₂SO₄ (TGS, триглицинсульфат);
- функциональные материалы – пьезоэлектрические кристаллы со структурой кагаллогерманата (CGG): La₃Ga₅SiO₁₄ (LGS, лангасит) и La₃Ga_{5.5}Ta_{0.5}O₁₄ (LGT, лангатат).

Финансирование: исследования проводились в аккредитованной лаборатории полупроводниковых материалов и диэлектриков «Монокристаллы и заготовки на их основе» НИТУ МИСИС при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ВУЗам FSME-2023-0003.

ОПТИЧЕСКИЕ ВОЛНОВОДЫ В СМЕШАННЫХ КРИСТАЛЛАХ НИОБАТА-ТАНТАЛАТА ЛИТИЯ

Сосунов А. В.¹, Корнилицын А. Р.¹, Петухов И. В.¹, Кунева М.⁴

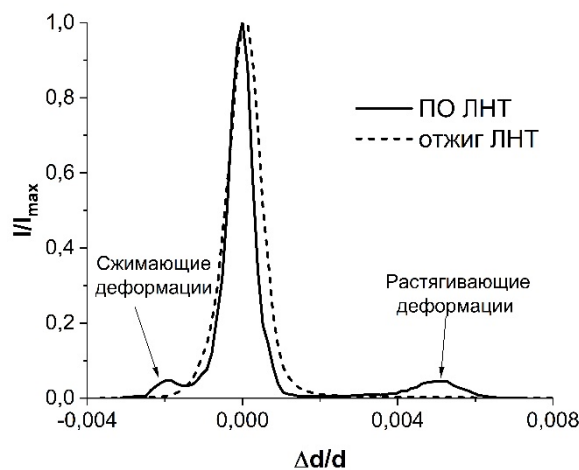
1) Пермский государственный национальный исследовательский университет,
e-mail: avsosunov@psu.ru

2) Национальный университет науки и технологий МИСиС

3) Институт физики твердого тела Болгарской академии наук

Новый тип смешанных кристаллов ниобата-танталата лития (ЛНТ) [1] может быть использован в качестве материала в интегральной фотонике, нелинейных преобразованиях и оптоэлектронике. Одним из простых и распространенных способов формирования оптических волноводов является протонный обмен [2]. Протонный обмен (ПО) проводили в закрытом циркониевом реакторе в расплаве чистой бензойной кислоты при температуре 190 °С в течение 2 часов с последующим отжигом при температуре 370 °С в течение 8 часов. В качестве исследуемых образцов выступали смешанные кристаллы $\text{LiNb}_{0.88}\text{Ta}_{0.12}\text{O}_3$ полученные методом Чохральского.

Результаты структурных исследований показывают наличие сжимающих (-0.002) и растягивающих (+0.005) деформаций, обусловленных изменением межплоскостного расстояния d кристаллической решетки образцов в ходе ПО (рис. 1). Это объясняется тем, что разный вид деформаций обусловлен одновременно наличием как атомов Nb, так и Ta. Это существенно отличает поведение образца ЛНТ при ПО от поведения ниобата лития. Фазовая модель смешанных кристаллов к настоящему моменту не разработана, однако результаты указывают на наличие кристаллических фаз β_1 и β_2 с приращением показателя преломления для данного образца $\Delta n_e = 0.129$. Штриховая линия на рис 1. указывает на переход к кристаллической структуре, близкой к структуре необработанного кристалла т.е. к α -фазе. Но восстановление полностью не происходит ($\Delta n_e = 0.022$). Расчеты параметров кристаллической решетки для смешанного кристалла после ПО даны в таблице ниже.



	Параметры решетки a, c [нм]
LiNbO₃	$a=0.51538$ $c=1.38773$
LiNb_{0.88}Ta_{0.12}O₃	$a=0.51574$ $c=1.38498$
ПО [LiNb_{0.88}Ta_{0.12}O₃]	$a_1=0.5166\pm 0.0002$ (растягивающие) $a_2=0.5129\pm 0.0002$ (сжимающие) $c=1.3898\pm 0.0004$

Рис. 1. Деформационные кривые после ПО и отжига исследуемых образцов

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Пермского края, договор № С-26/37.

Литература

- Zabelina E.V., Mololkin A.A., Kozlova, N.S. *et al.* Optical Properties of Crystals of Lithium Niobate–Tantalate Solid Solutions $\text{LiNb}_{1-x}\text{Ta}_x\text{O}_3$. // *Crystallogr. Rep.* – 2023. – V. 68.
- Сосунов А.В. и др. Влияние предварительного отжига пластин ниобата лития на характеристики протонообменных волноводов // *Кристаллография* (2022) **67**, с. 982-989.

ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ТОНКИХ ПЛЕНОК ХАЛЬКОГЕНИДОВ НА ПОЛИМЕРНОЙ ПОДЛОЖКЕ

Провоторов П. С.¹, Колобов А. В.¹

1) РГПУ им. А. И. Герцена, институт физики, физической электроники,
e-mail: p.provotorov95@yandex.ru

Выращивание кристаллов из стекловидных/аморфных матриц имеет существенное значение с нескольких точек зрения. Образование кристаллической фазы может считаться нежелательным (восприниматься как ухудшение качества стекла), поскольку оно значительно изменяет большинство свойств стекла, например, оптическую прозрачность, электрическую и теплопроводность, механическую обрабатываемость и т.д. В таких случаях необходимо идентифицировать факторы, запускающие процессы зарождения и роста кристаллов (например, температура, освещение, наличие механических /структурных /химических дефектов), и избегать их [1, 2].

Поскольку халькогениды часто используются в качестве оптических элементов, волноводов и датчиков в инфракрасной области спектра (из-за их высокой прозрачности) или в качестве транзисторов и переключателей (из-за их полупроводниковых свойств). На рост кристаллов в аморфных халькогенидных материалах может влиять ряд условий эксперимента: температура окружающей среды, освещение, наличие механических, структурных или химических дефектов, интенсивность внутреннего и/или внешнего напряжения в материале, близость окислительной атмосферы, границы раздела образец/ подложка и т.д. Эти аспекты тем более важны в случае тонких пленок из халькогенидов из-за их значительно большего отношения поверхности к объему (что приводит к более высокой реакционной способности сравнимым с объемным материалом), которые приводят к тщательному выбору подложки. Поэтому целью данной работы является исследование процесса кристаллизации халькогенидных пленок Se-Te, $(\text{GeS}_2)_{0.1}(\text{Sb}_2\text{S}_3)_{0.9}$ на полимерной подложке Kapton (поли-[4,4'-оксидифенилен-пиромеллитимид]).

Методами рентгеновской дифракции, дифференциальной сканирующей спектроскопией и рамановской спектроскопией представлена общая характеристика тонких пленок Se-Te, $(\text{GeS}_2)_{0.1}(\text{Sb}_2\text{S}_3)_{0.9}$, полученных методом термического испарения, на подложке полимерной ленты Kapton. Показано, что сходство температурного коэффициента расширения между халькогенидным материалом и Kapton в сочетании с эластичностью ленты Kapton не создает больших напряжений сжатия для пленки халькогенида, что приводит к “естественному” (объемному) поведению роста кристаллов. Интенсивность макроскопического роста кристаллов в осажденных пленках не зависела от природы подложки (Kapton или предметное стекло) и была аналогична скорости кристаллизации, наблюдаемой для порошкообразного объемного стекла толщиной ~ 30 мкм. Заметное ускорение кристаллизации происходило из-за механических дефектов что также подтверждено для порошкообразного объемного стекла [3].

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации (государственное задание № VRFY-2023-0005).

Литература

1. Svoboda R., Prikryl J., Cismancova V., Prokop V., Kolobov A.V., Krbal M. Crystal growth in amorphous selenium thin films reviewed and revisited: direct comparison of microscopic and calorimetric measurements // Cryst. Growth Des. – 2021 – V. 21
2. Thorpe M.F., Mitkova M.I. Amorphous, Insulators and Semiconductors, // Springer – 2010
3. Svoboda R. Prikryl J., Provotorov P., Kolobov A.V., Krbal M. Crystal Growth in Se–Te Chalcogenides: Overview of the Growth/Relaxation/Viscosity Interplay for Bulk Glasses and Thin Films // Cryst. Growth Des. – 2022 – V. 23