

РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ, СИНТЕЗА, ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ

Сборник научных трудов

1 Всероссийской конференции с международным участием,
посвященной памяти академика В. М. ИЕВЛЕВА

05–08 октября 2026 г.
Воронеж



Воронеж
Издательско-полиграфический центр
«Научная книга»
2026

УДК 620.22(08)
ББК 30.3я431
Р17

*Печатается по решению Организационного Комитета
I Всероссийской с международным участием научной конференции
«Развитие методов моделирования, синтеза, исследования структуры
и свойств материалов», посвященной памяти академика В. М. ИЕВЛЕВА*

Рецензенты:

*Программный Комитет I Всероссийской с международным участием
научной конференции «Развитие методов моделирования, синтеза,
исследования структуры и свойств материалов».*

Редакторы:

*Организационный Комитет,
Е. К. Белоногов, А. С. Прижимов, А. В. Костюченко, А. И. Донцов*

Р17

Развитие методов моделирования, синтеза, исследования структуры и свойств материалов : сборник научных трудов I Всероссийской конференции с международным участием, посвященной памяти академика В. М. ИЕВЛЕВА, 05–08 октября 2026 г., Воронеж / ред. : Е. К. Белоногов, А. С. Прижимов, А. В. Костюченко, А. И. Донцов. – Воронеж : Издательско-полиграфический центр «Научная книга», 2026. – 141 с. – ISBN 978-5-4446-2241-4. – Текст : непосредственный.

Сборник научных трудов содержит тезисы докладов физиков-твердотельщиков и материаловедов, участников конференции «Развитие методов моделирования, синтеза, исследования структуры и свойств материалов», Воронеж 05–08 октября 2026 г. В сборнике изложены научные результаты исследовательских работ ведущих учёных-материаловедов ОХНМ, ИОНХ им. Н. С. Курнакова РАН, ИМЕТ им. А. А. Байкова РАН, МГУ им. М. В. Ломоносова, ВГУ, ВГТУ и др. Книга адресована широкому научному сообществу, специалистам материаловедов, преподавателям физико-технического профиля, аспирантам и студентам – будущим специалистам по направлениям материаловедения, физики, химии. А также кругу читателей, интересующихся развитием фундаментальной и прикладной науки.

УДК 620.22(08)
ББК 30.3я431

ISBN 978-5-4446-2241-4

© Белоногов Е. К., Прижимов А. С.,
Костюченко А. В., Донцов А. И., 2026
© Оформление.
Издательско-полиграфический
центр «Научная книга», 2026

НАУЧНЫЕ СЕКЦИИ КОНФЕРЕНЦИИ

Цель конференции интегрировать:

- 1 секция КАДРЫ (Подготовка специалистов материаловедов)
- 2 секция ИДЕИ/МОДЕЛИ (Цифровое материаловедение)
- 3 секция МЕТОДЫ (Диагностика структуры и свойств материалов)
- 4 секция ПРОДУКТ (Синтез материалов, индустрия устройств)

Концептуальная триада конференции:

ОБРАЗОВАНИЕ—НАУКА—ИНДУСТРИЯ. Стратегия развития материаловедения: от фундаментальных знаний к реальному производству

Организаторы конференции:

Отделение химии и наук о материалах РАН; Научный совет РАН по конструкционным материалам; Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН; Институт металлургии и материаловедения имени А.А. Байкова РАН; Минобрнауки РФ; МГУ им. М.В. Ломоносова; Воронежский государственный университет; Воронежский государственный технический университет

СОПРЕДСЕДАТЕЛИ КОНФЕРЕНЦИИ:

Иевлев В.М.,

академик РАН, зав. каф. междисциплинарного материаловедения МГУ им. М.В. Ломоносова, зав. каф. материаловедения и индустрии наносистем ВГУ

Костин Д.В., д.ф.-м.н., зав. каф. математического моделирования, проректор по научной работе ВГУ

Солнцев К.А., академик РАН, отделение химии и наук о материалах РАН

Организационный комитет:

председатель Белоногов Е.К., учёный секретарь Прижимов А.С., Близняков Н.М., Бурлуцкая М.Ш., Донцов А.И., Козадеров О.А., Коротков Л.Н., Костюченко А.В., Леденева Т.М., Середин П.В., Ситников А.В., Сладкопевцев Б.В., Соцкая Н.В., Стогней О.В., Турищев С.Ю., Шестаков А.С., Шихалиев Х.С.

Место проведения:

**ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»,
Университетская площадь, дом 1, г. Воронеж, Россия**



19 апреля 2026 г. ушёл из жизни академик РАН Иевлев Валентин Михайлович (1938–2026) – выдающийся учёный-материаловед, мудрый педагог, вдохновенный организатор науки, заслуженный деятель науки РСФСР.

Иевлев В.М. родился в Липецкой области. Окончил физфак ВГУ (1961), работал инженером, в 1966 г. поступил в аспирантуру ВПИ, досрочно защитил кандидатскую, затем докторскую (1976) диссертации. Трудился деканом, профессором, завкафедрой, проректором, и всегда оставался прежде всего учёным, одержимым исследовательским поиском. В 1991 г. – член-корр., в 2008 г. – академик РАН по наноматериалам.

В 2004 г. Валентин Михайлович вернулся в родной ВГУ, создал кафедру материаловедения.

С 2013 г. до последних дней руководил кафедрой междисциплинарного материаловедения МГУ, объединяя усилия коллективов институтов РАН и воспитывая новое поколение исследователей.

Коллеги и ученики запомнили его спортивно подтянутым, немного суровым внешне, но необыкновенно отзывчивым и

щедрым на советы. Он умел слушать и вдохновлять. Таким он и останется в нашей памяти – человеком чести, обязательности и безграничной порядочности.

Валентин Михайлович оставил огромное научное наследие: основал крупнейшую в стране региональную лабораторию электронной микроскопии, руководил технопарком ВГУ. Его труды по кинетике роста плёнок, границам раздела, дислокационным моделям и вакуумным технологиям легли в основу микроэлектроники нового поколения. Он был признанным лидером в своей области.

Его заслуги отмечены высокими наградами – от медали «За заслуги перед Отечеством» до почётного знака Воронежской области и звания почётного доктора ЛГТУ. Главное – он создал школу, воспитал десятки учеников, которые по всей стране сегодня помнят его и всегда с благодарностью произносят: «я – ученик В.М. Иевлева», а эта волшебная фраза открывает любые двери.

Валентин Михайлович был человеком энциклопедических знаний, государственного масштаба мышления. Светлая, тёплая память о нём навсегда останется в сердцах всех, кто имел счастье знать его и учиться у него.

Ученики, коллеги В.М. Иевлева

Пленарные.
Устные доклады

А. Б. Ярославцев^{а,б}^а *Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва, 119991, Российская Федерация*^б *Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук, Москва, 119991, Российская Федерация***e-mail: yaroslav@igic.ras.ru*

В последние годы повышенное внимание уделяется вопросам экологии, в связи с чем в России была принята Программ развития водородной энергетики. Для ее становления необходимо масштабное производство высокочистого водорода, большая часть которого получается конверсией природного газа и угля, и его необходимо глубоко очищать от примесей. Такую очистку могут обеспечить лишь палладийсодержащие мембраны. Для широкого круга процессов гидрирования, дегидрирования, а также для одностадийного получения высокочистого водорода актуальными является использование мембранного катализа в реакторах с палладиевыми мембранами. В данном докладе рассмотрены различные типы мембран на основе палладия и их применение в различных процессах с участием водорода.

Существует ряд металлов, отличающихся еще большей проницаемостью по водороду, среди которых можно отметить ванадий, ниобий, тантал и вольфрам. Однако эти металлы активно окисляются и подвержены водородному охрупчиванию, что практически исключает их использование в процессах очистки водорода [1]. Наиболее распространенным подходом для подавления фазовых переходов и повышения проницаемости по водороду является использование сплавов палладия с серебром, медью, золотом, рутением и некоторыми другими металлами.

Мембраны на основе Pd обычно изготавливаются методом холодной прокатки [2]. При этом поверхность мембран может блокироваться следами смазочных масел или сорбированных из воздуха оксида углерода, других газов или жидких веществ. Поэтому перед использованием мембраны подвергают термической, фотонной или ультразвуковой обработке [3]. Для интенсификации сорбционных процессов практикуется и увеличение площади поверхности мембран, за счет нанесения высокопористого наноструктурированного слоя палладия. Известны примеры повышения каталитической активности палладия нанесением наночастиц для переноса водорода или электроокисления спиртов. Палладиевые нанозвезды, полученные на поверхности пленки Pd-Ag, позволили достичь рекордного увеличения проницаемости по водороду (до $12.5 \text{ ммоль с}^{-1} \text{ м}^{-2}$) при 100°C [4].

Тонкие пленки не выдерживают высоких перепадов давления водорода, необходимого для его эффективной очистки. Для этого используют композиционные мембраны с тонким селективным слоем палладиевого сплава, нанесенным на пористую подложку [5]. Наиболее более востребованы подложки из нержавеющей стали, для которых менее выражены проблемы с КТР. Некоторые металлы с более высокой проницаемостью по сравнению с палладием, используются для формирования мембраны, в которой палладий выступает в качестве тонкого защитного покрытия [6].

Привлекательность подхода, связанного с использованием реакторов с палладиевыми мембранами, определяется возможностью совмещения химического процесса со стадией выделения и очистки продуктов. Паровая конверсия спиртов протекает при достаточно низких температурах, требуя меньших энергозатрат и позволяя получать CO_2 в качестве основного сопродукта. Процесс паровой конверсии в мембранном реакторе позволяет значительно

повысить конверсию спиртов выше термодинамически равновесной и получить водород высокой чистоты в одну стадию [7]. Мембранные реакторы активно используются и для получения чистого водорода при разложении жидких носителей водорода, среди которых внимание исследователей привлекает процесс разложения аммиака, продукт которого в обычных реакторах всегда загрязнен аммиаком, являющегося каталитическим ядом для топливных элементов на протонообменных мембранах.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИОХХ РАН и ИНХС РАН.

1. Alentiev D.A., Bermeshev M.V., Volkov A.V., Petrova I.V., Yaroslavl'tsev A.B.// Polymers 2025. V.17, 743. doi:10.3390/polym17060743
2. Ievlev V.M., Dontsov A.I., Gorbunov S.V., Il'ina T.N., Kannykin S.V., Prizhimov A.S., et al.// Inorg Mater 2021. V.57. P.1194–200. doi:10.1134/S0020168521110054.
3. Mironova E.Y., Dontsov A.I., Morozova N.B., Gorbunov S.V., Ievlev V.M., Yaroslavl'tsev A.B.// Inorg Mater 2021. V.57. P.781–789. doi:10.1134/S0020168521080057.
4. Petriev I.S., Pushankina P.D., Andreev G.A., Yaroslavl'tsev A.B.// Int. J. Hydrogen Energy 2024, V. 70, P. 404–413 doi:10.1016/j.ijhydene.2024.05.201
5. Petriev I.S., Pushankina P.D., Ivanin S.N., Papezhuk M.V., Khachatryan A.S., Achoh A.R., Yaroslavl'tsev A.B.// Separation and Purification Technology. 2026. V. 382 136070 doi:10.1016/j.seppur.2025.136070
6. Kuzenov S.R., Alimov V.N., Busnyuk A.O., Peredistov E.U., Livshits A.I.// J Memb Sci. 2023. V.674. 121504. doi:10.1016/j.memsci.2023.121504.
7. Mironova E., Zarubina V., Petriev I., Pushankina P., Zhilyaeva N., Stenina I., Yaroslavl'tsev A.// J. Membrane Sci. 2026, V.740, 124974. doi:10.1016/j.memsci.2025.124974

Фундаментальные направления развития современной металлургии

А. А. Ремпель^{а,*}

^а *Институт металлургии имени академика Н.А. Ватолина Уральского отделения
Российской Академии наук, Екатеринбург, 620016 Россия*

**e-mail: rempel.imet@mail.ru, +79226031145*

Современная металлургия известна существенным углублением фундаментальных представлений о взаимосвязи состава, структуры и свойств материалов, а также расширением методов их целенаправленного управления. Металлургия традиционно охватывает как процессы извлечения металлов из природного и техногенного сырья, так и задачи формирования структуры и свойств металлических, керамических и композитных металлокерамических материалов. В наше время принципиально важно рассматривать металлургию не только как совокупность технологий, но и как междисциплинарную область исследований, опирающуюся на фундаментальные науки, такие как физическая химия, физика конденсированного состояния, химия твердого тела, термодинамика и материаловедение.

В докладе обсуждается современное понимание металлургии как науки, в которой ключевую роль играют термодинамические и кинетические закономерности кристаллизации, фазовых превращений и химических реакций, механизмы формирования дальнего и ближнего порядков, микроструктуры, морфологии и их связь с эксплуатационными свойствами товарных продуктов металлургии. Особое внимание уделяется тому, что свойства определяются сложными многоуровневыми и разномасштабными механизмами, включающими химические взаимодействия, химическую неоднородность, дефекты атомной структуры и метастабильность.

Е. А. Гудилин*

ФГБОУ ВО Московский государственный университет, Москва, 119991 Россия

*e-mail: goodilin@yandex.ru , +74959394609

Классическая концепция «реальной структуры твердого тела», развивавшаяся в МГУ имени М.В.Ломоносова академиком Ю.Д.Третьяковым, членом – корреспондентом РАН Н.Н.Олейниковым и впоследствии академиком В.М.Иевлевым включает в себя прогностический анализ микроструктурных и структурных особенностей, а также дефектной структуры твердофазного состояния как эффективный инструмент направленного создания перспективных материалов. В последние десятилетия проведены результативные исследования в области создания новых перовскитных материалов на основе сверхпроводящих РЗЭ-бариевых купратов, манганитов с эффектом колоссального магнетосопротивления, а также гибридных органо-неорганических галогенпльомбитов свинца. Несмотря на существенные различия ключевых химических особенностей указанных материалов, концепция контроля функциональных характеристик данных материалов за счет варьирования типов и концентрации дефектов на различных иерархических уровнях организации твердого тела в полной мере подтверждается всем комплексом экспериментальных данных.

В докладе будет проведен анализ областей гомогенности, влияния дефектов замещения и антиструктурных дефектов на локальную структуру и структуру дальнего порядка, роли предистории получения на сверхпроводящие характеристики неодим –бариевых купратов, а также на магнитные характеристики купроманганитов с эффектом туннельного магнетосопротивления. Отдельное внимание будет уделено сопоставительному анализу влияния микроструктуры, строения границ зерен и областей когерентного рассеяния на целенаправленное формирование требуемых транспортных и других функциональные характеристик перовскитных сверхпроводников, материалов с эффектом КМС и нового поколения тонкопленочных светопоглощающих слоев на основе гибридных перовскитов для солнечной энергетики.

Новые экологически безопасные титановые сплавы

Колмаков А.Г., Севостьянов М.А., Конушкин С.А., Каплан М.А.
ИМЕТ РАН

Существующие в настоящее время сплавы титана отличаются достаточно высоким комплексом эксплуатационных характеристик, в т.ч. высокой удельной прочностью, коррозионной стойкостью, и в ряде случаев неплохой биосовместимостью. В связи с этим они нашли широкое в авиакосмической промышленности, судостроении, медицине, химической промышленности, автомобильной технике, военной технике и т.п. Ярким примером может служить отечественный сплав ВТ6 многоцелевого применения, разработанный в ВИАМ (аналогичен зарубежному сплаву Ti-6Al-4V), который успешно используется как в технике, так и в медицине в качестве материала ортопедических имплантатов. Сплав имеет механические характеристики на уровне: $E = 104...115$ ГПа, $\sigma_{0,2} = 800...920$ МПа, $\sigma_B = 850...1000$ МПа, $\delta = 4...18$ %. Примерами высокопрочных титановых сплавов, используемых в авиакосмической промышленности, могут служить такие сплавы, созданные в ВИАМ, как ВТ47 (Ti-Al-Mo-V-Cr-Fe-Y), ВТ23 (0,8...1,4 Cr, 4-5 V, 1,5-2,5 Mo, 0,4...1 Fe мас.%) и ВТ22 (4-6 Al, 4-6 V, 4-6 Mo, 0,5...1,5 Cr, 0,5...1,5 Fe мас.%). Например, сплав ВТ47 имеет механические свойства на уровне $\sigma_B = 1200...1320$ МПа, $\delta = 5...10$ %, сплав ВТ23 - $\sigma_B = 1050...1225$ МПа, $\delta = 5...16$ %, а сплав ВТ22 - $E \approx 114$ ГПа, $\sigma_{0,2} = 1000...1090$ МПа, $\sigma_B = 1100...1170$ МПа, $\delta = 8...12$ %. Существуют титановые сплавы, разработанные в ЦНИИ КМ «Прометей», в т.ч. корпусной сплав ПТ-3В; сплавы для машиностроения марок ПТ-3В, 3М, ТЛ-3, ТЛ-5; сплавы для энергетики марок ПТ-1М, ПТ-7М. Такие сплавы в зависимости от марки имеют механические характеристики в диапазоне $\sigma_B = 540...885$ МПа, $\delta = 9...12$ %.

В то же время как отечественные сплавы, так и их зарубежные аналоги в качестве основных легирующих элементов используют Al, V и Cr. Сплавы с памятью формы типа нитинол Ti-Ni, используемые в промышленности и медицине, содержат в больших количествах Ni. К сожалению, Ni, Cr, V и Al активно выходят из материалов в жидкие среды, а также в ходе производства и эксплуатации конструкций и изделий попадают в окружающую среду в виде осколков, частиц и пыли (например, при коррозии, износе и механических повреждениях). В конечном итоге они могут попадать в организмы растений, животных и человека и оказывать разностороннее токсическое воздействие.

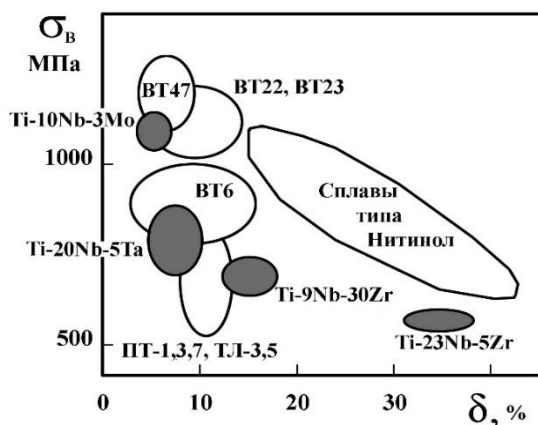
Особенно опасными для человека являются Ni и Cr. В частности, клетки живых организмов легко захватывают Cr(VI), который вызывает широкий спектр повреждений в том числе повреждаются ДНК и хромосомы. У людей и животных это вызывает целый спектр опасных заболеваний. Присутствие хрома для растений приводит к снижению всхожести семян, замедлению роста растений, снижению урожайности, ослаблению фотосинтеза и усвояемости питательных веществ и генетическим мутациям. Накопление в организме никеля, обладающего генотоксическим и мутагенным действием, приводит к онкологическим заболеваниям, фиброзу легких, сердечно-сосудистым и почечным заболеваниям.

Пылевые частицы, содержащие V, вызывают у человека гипертонию, аритмию, системное воспаление, гиперкоагуляция, рак и гиперреактивность бронхов. Повышенное содержание Al в почве негативно воздействует на корневую систему растений и приводит к деформации листьев и падению урожайности зерновых культур. При выпадении "кислотных дождей" токсичность алюминия повышается, поскольку он переходит в растворимое состояние, вымывается из глины и накапливается в корнях растений, вызывая в клетках заметные нарушения, в т.ч. генома и хромосом. Присутствие же Al может вызывать у человека неприятные аллергические реакции.

В связи с этим в последнее время началась разработка и внедрение новых титановых сплавов, не содержащих Cr, Ni, V и Al. В первую очередь такие сплавы создаются для медицинских изделий. Это связано также и с тем, что используемые в настоящее время для имплантатов Ti и Ti-6Al-4V имеют значения модуля упругости $E > 100$ ГПа, в то время как у

костной ткани человека $E \leq 30$ ГПа. Такое несовпадение упругого поведения вызывает стрессовую щелевую коррозию и механическую несовместимость (эффект экранирования) имплантата с костной тканью и может привести к значительным осложнениям для пациентов.

В новых сплавах классические легирующие элементы V, Al, Cr заменяются на Nb, Fe, Mo, Ta, Hf и Zr. Эти элементы не токсичны для человека и других организмов. Предполагается, что такие элементы, как Ta, Nb, Zr и Hf, могут иметь благоприятную бионейтральность, характерную для чистого титана. Также легирование Nb позволяет улучшить коррозионную стойкость, биосовместимость и технологичность, введение Zr и Mo повышает механические характеристики, Ta считается нетоксичным β -стабилизатором. Также Ta и Zr образуют при пассивации слои, с хорошей адгезией к металлической подложке новые сплавы имеют лучшую коррозионную стойкость по сравнению с Ti и Ti-6Al-4V. Кроме того, у новых сплавов можно достигнуть $E \leq 90$ ГПа. Известно, что уже исследуются $\alpha + \beta$ -сплавы и β -сплавы Ti-(26-27)Nb, Ti-(20-22)Nb-(2-6)Zr, Ti-(1-20)Nb-(10-30)Ta и Ti-29Nb-13Ta-4,6Zr, обладающие примерно следующими механическими свойствами: $E = 60 \dots 80$ ГПа, $\sigma_{0,2} = 450 \dots 750$ МПа, $\sigma_B = 700 \dots 850$ МПа, $\delta = 12 \dots 19$ %.



Сравнительная схема механических характеристик ряда существующих (светлый фон) и новых (темный фон) титановых сплавов.

В ИМЕТ РАН к настоящему времени разработан ряд сплавов систем Ti-Nb-Ta, Ti-Nb-Ta-Zr и Ti-Nb-Mo [1-9]. В частности, на сплаве Ti-20Nb-5Ta, было получено значение модуля упругости уже частично приближающееся к таковому для человеческой кости: $E = 47 \dots 55$ ГПа, $\sigma_{0,2} = 220 \dots 530$ МПа, $\sigma_B = 620 \dots 850$ МПа, $\delta = 5 \dots 10$ %. Сплавы Ti-Nb-Mo отличаются повышенными прочностными свойствами: $E = 53 \dots 59$ ГПа, $\sigma_{0,2} = 580 \dots 810$ МПа, $\sigma_B = 890 \dots 1110$ МПа, $\delta = 6 \dots 14$ %. Такие сплавы можно характеризовать как природоподобные или природосовместимые, так как их механические характеристики достаточно близко приближаются к характеристикам костной ткани человека и животных, а их легирующие элементы являются безопасными для человека даже при помещении этих сплавов внутрь организма. Разработанные новые титановые сплавы можно успешно применять также в качестве конструкционных материалов в высокотехнологичных отраслях промышленности. По сравнению с используемыми в настоящее время высокопрочными титановыми сплавами новые сплавы наряду с биологической безопасностью и даже биосовместимостью, обладают сходными механическими характеристиками и себестоимостью, а также лучшей коррозионной стойкостью.

Новые сплавы показали высокую эффективность и при получении из них изделий методами аддитивных технологий.



Эндопротез тазобедренного сустава из нового сплава, напечатанный с использованием селективного лазерного сплавления

Работа выполнена при поддержке Гранта РНФ 24-13-00186.

Литература

1. Sergienko K.V., Konushkin S.V., Morozova Y.A., Sudarchikova M.A., Kaplan M.A., Zhidkov V.K., Sevostyanova T.M., Simakin A.V., Baimler I.V. Sevostyanov M.A., Kolmakov A.G. Structure and Mechanical Properties of Ti-38Zr-(8-10)Nb (at. %) Alloys for Medical Use // Journal of Functional Biomaterials. 2026. V.17. ID 179. DOI: 10.3390/jfb17040179
2. Баикин А.С., Конушкин С.В., Насакина Е.О., Каплан М.А., Жидков В.К., Морозова Я.А., Сударчикова М.А., Сергиенко К.В., Севостьянов М.А., Колмаков А.Г. Микроструктура и механические свойства сплавов Ti—20Nb—xTa (x = 5—9 ат.%) // Деформация и разрушение материалов. 2026. № 3. С.20-26. DOI: 10.31044/1814-4632-2026-3-20-26
3. Сергиенко К.В., Морозова Я.А., Конушкин С.В., Сударчикова М.А., Каплан М.А., Насакина Е.О., Горбенко А.Д., Артюгина Д.С., Жидков В.К., Шут В.Н., Кабанова А.А., Симакин А.В., Баймлер И.В., Долгалев А.А., Севостьянов М.А., Колмаков А.Г., Влияние термической обработки на структуру и физико-механические свойства β -титанового сплава для имплантируемых медицинских изделий // Деформация и разрушение материалов. 2026. № 1. С.12-19. DOI: 10.31044/1814-4632-2026-1-12-19
4. Каплан М.А., Конушкин С.В., Сергиенко К.В., Горбенко А.Д., Жидков В.К., Волчихина М.А., Севостьянова Т.М., Морозова Я.А., Иванников А.Ю., Фролова М.Г., Колмаков А.Г., Севостьянов М.А. Получение и исследование титанового сплава Ti-38Zr-9Nb (ат. %) медицинского назначения // Доклады российской академии наук. Химия, науки о материалах. 2025. Т. 520. С. 33–40. DOI: 10.31857/S2686953525010048
5. Севостьянов М.А., Каплан М.А., Конушкин С.В., Морозова Я.А., Севостьянова Т.М., Сергиенко К.В., Горбенко А.Д., Лысенков А.С., Михлик С.А., Иванников А.Ю., Кузнецова О.Г., Насакина Е.О., Жидков В.К., Пруцков М.Е., Сударчикова М.А., Колмаков А.Г. Структура, механические свойства и коррозионная стойкость медицинских сплавов Ti—10Nb—(1—3)Mo (ат. %) // Деформация и разрушение материалов. 2025. № 5. С.11-20. DOI: 10.31044/1814-4632-2025-5-11-20
6. Севостьянов М.А., Конушкин С.В., Каплан М.А., Морозова Я.А., Севостьянова Т.М., Сергиенко К.В., Горбенко А.Д., Насакина Е.О., Жидков В.К., Гаврильченко А.Р., Баранов Е.Е., Сударчикова М.А., Колмаков А.Г. Влияние содержания тантала на структуру, механические и биохимические свойства сплавов Ti—20Nb—xTa (x = 7,5; 10,0 ат. %) для медицинских имплантатов // Деформация и разрушение материалов. 2025. № 5. С.2-10. DOI: 10.31044/1814-4632-2025-5-2-10
7. Мешалкин В.П., Колмаков А.Г., Nzioka A.M., Банных И.О., Севостьянов М.А., Конушкин С.В., Каплан М.А., Чистякова Т.Б. Конструкционные металлические сплавы: на пути к экологичным материалам // Успехи химии. 2025. Т.94. №5. ID: RCR5165. DOI: 10.59761/RCR5165
8. Sergienko K.V., Konushkin S.V., Morozova Y.A., Kaplan M.A., Gorbenko A.D., Rumyantsev B.A., Prutskov M.E., Baranov E.E., Nasakina E.O., Sevostyanova T.M., Mikhlik S.A., Chizhikov A.P., Shatova L.A., Simakin A.V., Baimler I.V., Sudarchikova M.A., Kheifetz M.L., Kolmakov A.G., Sevostyanov M.A. Study of the Structure and Mechanical Properties of Ti-38Zr-11Nb Alloy // Journal of Functional Biomaterials. 2025. V.16. ID126. DOI: 10.3390/jfb16040126
9. Sergienko K.V., Konushkin S.V., Kaplan M.A., Gorbenko A.D., Guo Y., Nasakina E.O., Sudarchikova M.A., Sevostyanova T.M., Morozova Y.A., Shatova L.A., Mikhlik S.A., Sevostyanov M.A., Kolmakov A.G. Physical and Mechanical Properties of Ti-Zr-Nb Alloys for Medical Use // Metals. 2024. V.14. №1311. DOI: 10.3390/met14111311

Элементный состав специальных межкристаллитных границ в поликкомпонентных кристаллах

Б.М. Даринский, А.С. Прижимов

*ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет,
Воронеж, 394018 Россия*

e-mail: darinskii@mail.ru

Построена классификация специальных межкристаллитных границ в кристаллах произвольной симметрии на основе симметричных свойств плоских решеток, являющихся кристаллографическими плоскостями этих кристаллов. В общем случае указаны три типа границ, различающихся операцией преобразования контактирующих кристаллов, и их характерные свойства.

Указаны возможные структуры плоских ячеек кристаллических плоскостей на основе параметров Вайкоффа (Wyckoff) для примитивной, гранецентрированной и объемно-центрированной кубических решеток.

Найдены закономерности изменения атомных структур и элементных составов межкристаллитных границ при чередовании кристаллографических плоскостей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания вузам в сфере научной деятельности на 2026–2028 годы (проект №FZGU-2026-0009).

Фазовый состав и молекулярные связи гибридных наноструктур пористого кремния с осажденным циннаризином

Э.П. Домашевская^{1*}, А.С. Леньшин^{1,2}, Ю.А. Полковникова¹, О.В. Черноусова²,
В.Е. Фролова¹, И.Е. Занин¹.

¹Воронежский государственный университет,

Университетская пл., 1, Воронеж 394018, Российская Федерация

²Воронежский государственный университет инженерных технологий,

Проспект Революции, 19, Воронеж 394036, Российская Федерация

e-mail: ftt@phys.vsu.ru, tel/fax: 2208-363

Целью работы являлось формирование гибридных наноструктур пористый кремний – циннаризин CIN/por-Si и исследование особенностей их фазового состава и молекулярных связей. Осаждение циннаризина на пластины кремния с por-Si производилось двумя способами: химическим методом осаждения циннаризина в растворе соляной кислоты и механическим методом spin-coating нанесения раствора с циннаризином, как при комнатной температуре, так и с подогревом до 50°C.

Сформированные образцы исследовались методами просвечивающей ПЭМ и растровой РЭМ микроскопии, рентгенофазового анализа РФА и оптической ИК- и УФ-спектроскопии.

Результаты РФА исследований показали преобладание аморфной фазы циннаризина в гибридных наноструктурах CIN/por-Si (Рис.1) с сохранением его молекулярной структуры, охарактеризованной данными ИК-спектроскопии.

Методом УФ- спектроскопии в спектрах поглощения гибридных наноструктур CIN/por-Si обнаружен дополнительный прямой зона-зонный переход, не принадлежащий por-Si, с энергией ~ 1.5 эВ, природа которого может быть связана с особенностями оптического поглощения циннаризина в составе наноструктуры, обусловленными образованием его связей с пористым кремнием.

Источник финансирования: исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда РФ № 25-22-00292 и при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках Госзадания для университетов в области научной деятельности, проект № FZGU-2026-0009

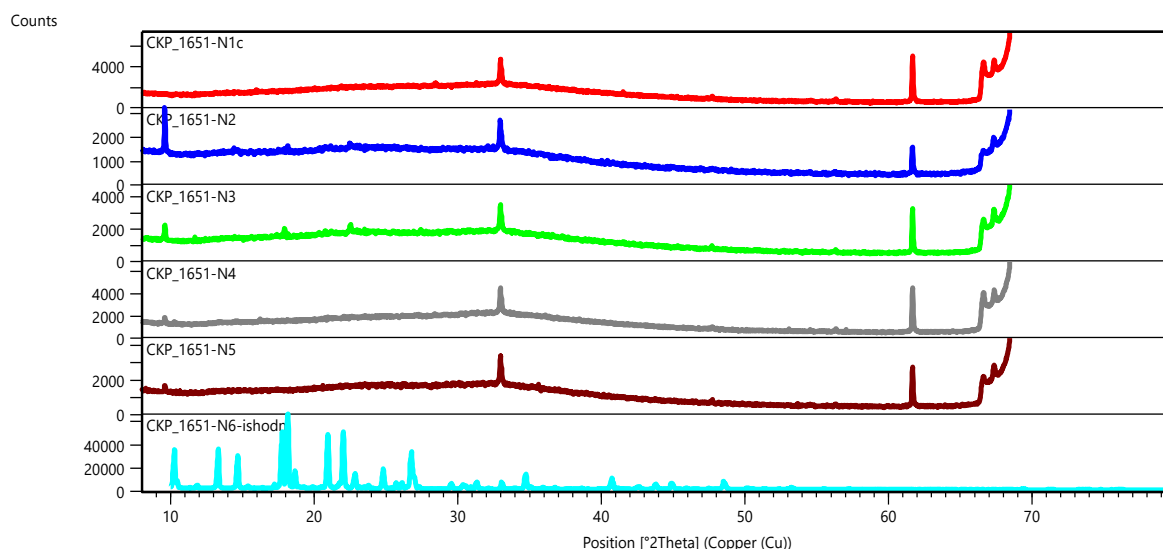


Рис.1. Дифрактограммы образцов (сверху-вниз): **1** - исходный *por-Si/c-Si(100)* (эталон сравнения); образец **2**- *CIN/por-Si*: химическое осаждение циннаризина на *por-Si* в 0.1 М водном растворе соляной кислоты в течение 30 минут при комнатной температуре; образец **3** *CIN/por-Si* - аналог образца **2** с нагревом раствора до 50°C; образец **4** *CIN/por-Si* : осаждение раствора циннаризина на *por-Si* методом *spin-coating* в течении 1 минуты и скорости вращения 1000 об./мин; образец **5** *CIN/por-Si* – аналог образца **4**, с нагревом до 50°C во время вращения образца; образец **6**-исходный коммерческий порошок циннаризина *CIN*/ (эталон сравнения).

Высокопористый углеродный адсорбент из панцирей креветок для регулирования состава питательной среды при микроклональном размножении растений

Дьячкова Т.П.^{а,*}, Меметова А.Е.^а, Зеленин А.Д.^а, Ягубов В.С.¹, Гутник И.В.^а,
Дмитриевский А.А.^б, Меметов Н.Р.^а

^а ФГБОУ ВО Тамбовский государственный технический университет, Тамбов, 392000
Россия

^б ФГБОУ ВО «Тамбовский государственный университет имени Г.Р. Державина»,
Тамбов, 392036 Россия

*e-mail: dyachkova_tp@mail.ru, +74752635598

Тканевая культура растений является одним из прогрессивных инструментов биотехнологий и может быть использована, например, для сохранения насаждений ценных видов деревьев. Однако эффективность культивирования эксплантов часто ограничивается накоплением ингибирующих метаболитов (фенольных соединений, этилена) и нестабильностью фитогормонов в питательной среде. Оптимизацию состава культуральных сред можно осуществлять посредством селективного удаления мешающих жизнедеятельности проростков компонентов посредством адсорбции. Обычно используемые в качестве адсорбентов активированные угли для данной области применения не подходят ввиду низкой эффективности.

Целью данного исследования явилась разработка способа получения из отходов креветок углеродного биосорбента с ультравысокой пористостью и оценка его потенциала для сорбционной регуляции питательных сред при культивировании растений *in vitro* (на примере проростков дуба черешчатого).

Для получения адсорбента отходы (панцири креветок) измельчали и подвергали карбонизации при 650°C в атмосфере аргона, после чего проводили химическую активацию гидроксидом калия (массовое соотношение КОН/карбонизат составляло 4:1) при 750°C в течение 2 часов. На конечной стадии продукт отмывали от избытка щелочи и примесей и сушили. Пористую структуру экспериментального материала анализировали методом низкотемпературной сорбции азота (БЭТ, DFT). Физико-химические характеристики определяли с помощью рентгенофазового анализа, ИК- и КР-спектроскопии. Сорбционную активность по отношению к модельным ингибиторам роста (галловая кислота, кверцетин, танин) оценивали в статических условиях при 25°C.

Полученный материал характеризуется рекордной удельной поверхностью ($S_{\text{БЭТ}} = 3052 \text{ м}^2/\text{г}$), суммарным объемом пор ($2,6 \text{ см}^3/\text{г}$) и высокой долей мезопор (86%), что должно обеспечивать эффективную диффузию крупных органических молекул. По данным физико-химического анализа, биоуголь имеет турбостратную структуру с высокой долей дефектов ($i_D/i_G = 1,31$), которые наряду с идентифицированными по ИК-спектрам кислородсодержащими функциональными группами являются активными центрами сорбции органических веществ. В модельных экспериментах биосорбент показал эффективное связывание фенольных соединений.

Таким образом, предлагаемый метод переработки отходов позволяет получить ценный продукт с уникальными характеристиками. Его использование в технологии микроклонального размножения дуба черешчатого *in vitro* позволяет обеспечить селективное удаление токсичных фенолов, ингибирующих морфогенез, способствуя повышению приживаемости и регенерационной способности культуры.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного Фонда (проект № 26-16-20053).

А. Р. Кауль*, М. Н. Маркелова, А. А. Хафизов, И. Э. Грабой

*ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»,
Москва, 119991 Россия**e-mail: arkaul@mail.ru, +74959391492

Современная наука и техника широко используют оксидные материалы с различными функциональными свойствами в виде тонких пленок. Последние представляют собой особый класс материалов, в которых взаимосвязи состав-структура-свойства осложняются ориентирующим влиянием подложки, ослабевающим по мере увеличения толщины пленок. Наблюдающиеся при этом явления гетероэпитаксиальной стабилизации, топотаксии, образования вариантных структур, упругой деформации кристаллизующихся пленок, зависимость этих явлений от способов и условий получения пленок чрезвычайно разнообразят наблюдаемые эффекты и открывают новые возможности воздействия на свойства функциональных материалов.

Лаборатория химии координационных соединений МГУ им. Ломоносова успешно развивает метод химического осаждения оксидных пленок из паровой фазы металлоорганических соединений (МОСVD) как в техническом отношении (разработаны установки с питателями различных типов), так и в смысле химизма процессов осаждения: помимо традиционного окислительного пиролиза используется пирогидроллиз, а также активация роста пленок в парах летучего легкоплавкого флюса. Последние работы сфокусированы на МОСVD эпитаксиальных пленок феррогранатов РЗЭ и изучении взаимосвязи их свойств с реальной структурой. Эти исследования приобрели особую актуальность в связи с потребностями спинтроники в тонкопленочных ферритмагнетиках и нанотолщинных гетероструктурах, включающих слои гранатной структуры. Проанализированы явления химического высокотемпературного взаимодействия на границе пленок с подложками $Gd_3Ga_5O_{12}$ и $Gd_3Al_xGa_{5-x}O_{12}$. Выявлено влияние упругих эпитаксиальных напряжений и толщины пленок на важнейшую характеристику – ширину линии ферромагнитного резонанса (ФМР). Экспериментально доказано, что эпитаксия способствует заселению ионами РЗЭ не только додекаэдрических, но также частично и октаэдрических позиций структуры граната, нормально занимаемых только ионами железа. Образование антиструктурных дефектов $[R^{3+}_{Fe3+}]^x_{oct}$ приводит к сильному увеличению параметра ЭЯ граната и получению пленок РЗЭ-избыточных составов $R_{3+x}Fe_{5-x}O_{12}$, не характерных автономным материалам в тех же оксидных системах. Установлено, что склонность к образованию антиструктурных дефектов ослабевает с увеличением ионного радиуса РЗЭ. Показано, что эпитаксиальное качество и поверхностная шероховатость пленок $Lu_3Fe_5O_{12}$, осажденных при ассистирующем действии паров летучего легкоплавкого флюса, кардинально улучшаются, что позволило получить пленки с чрезвычайно узкой шириной линии ФМР (7 Э), пригодные для изготовления спинтронных устройств.

Влияние дефектов структуры на неупругие и электрические свойства аморфного оксида олова

Ю. Е. Калинин*, А.В. Ситников, И.И. Попов, В.Б. Багатнов

ФГБОУ ВО Воронежский государственный технический университет
Воронеж, 394006 Россия

*e-mail: kalinin48@mail.ru, тел.: +7(473) 246-66-47

Точечные дефекты, дислокации, дефекты упаковки и другие несовершенства кристаллической решетки определяют физические свойства кристаллов, управляют процессами диффузии, значительно влияют на электрические, магнитные и тепловые свойства. Другими словами, физические свойства кристаллов структурно-чувствительны и в существенной степени зависят от наличия в материале тех или иных дефектов кристаллической структуры и их концентрации. Результаты исследований аморфных твердых тел показывают, что их свойства также структурно-чувствительны и зависят от условий получения, последующей термообработки и других внешних воздействий на их внутреннюю структуру. По аналогии с кристаллами структурно-чувствительные свойства аморфных твердых тел принято связывать с присутствием в их структуре точечных дефектов. Для ковалентно-связанных стекол которыми являются неорганические, халькогенидные стекла или аморфные полимеры, в качестве «идеальной структуры» удобно принять непрерывную сетку Захариасена [1], а оборванные связи рассматривать как дефекты аморфной структуры.

В предлагаемом докладе представлен анализ результатов последних исследований по влиянию таких дефектов на неупругие и электрические свойства тонкопленочного оксида олова с аморфной структурой. В частности, установлено, что наблюдаемые максимумы β -релаксации в аморфном оксиде олова связываются с переориентацией упругих диполей в области дефектов по олову и кислороду аморфной структуры, а α -релаксации с диффузией самих дефектов. При этом экспоненциальный рост внутреннего трения в области α -релаксации связывается с термоактивированной миграцией дефектов аморфной структуры (неравновесных до температуры стеклования (T_g) и равновесных выше T_g) под действием механических напряжений. Показано, что процессы стеклования и α -релаксации аморфных твердых тел представляют два независимых процесса. Если процесс стеклования связан с замораживанием концентрации дефектов аморфной структуры (при температуре стеклования), то α -релаксация с максимумом выше T_g вследствие совпадения частоты механических колебаний с обратным временем диффузии дефектов от одного края образца до другого.

Процессы структурной релаксации или твердофазной реакции до температуры стеклования в аморфном оксиде олова приводят к аннигиляции дефектов аморфной структуры, снижению плотности локализованных состояний на уровне Ферми и росту электрического сопротивления. При температурах выше температуры стеклования в аморфном оксиде олова образуются равновесные дефекты структуры, приводящие к росту плотности локализованных состояний на уровне Ферми и снижению электрического сопротивления.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания, проект № FZGM-2026-0003.

1. W. H. Zachariasen. The atomic arrangement in glass // J. Amer. Chem. Soc. 1932. – V. 54. – No 10. – P. 3841-3851. DOI: 10.1021/ja01349a006.

Особенности фундаментального материаловедческого образования в филиале МГУ в городе Душанбе

А. В. Кнотько*, В. И. Путляев

ФГБОУ ВО Московский государственный университет, Москва, 119991 Россия

*e-mail: knotkoav@my.msu.ru, +74959394259

С 2011 направление «Химия, физика и механика материалов» реализуется (по инициативе таджикской стороны) в филиале МГУ в городе Душанбе. Реализация данного направления подготовки в Душанбе связана с решением ряда проблем, связанных с отличием местных условий от сложившихся на факультете наук о материалах в московской части МГУ. Это, во-первых, более слабый уровень школьной естественнонаучной подготовки поступающих, во-вторых, слабая материальная база филиала. К этому можно добавить отсутствие (по вполне объективным причинам) в филиале магистратуры (только бакалавриат). Решение первой из указанных проблем приводит к переносу курса неорганической химии с 1 курса на 4, при этом на 1 курсе остается, по сути, курс, соответствующий школьной химии в России, с практикумом по основам химии, читаемый преподавателями из Душанбе. К сожалению, после ковидных ограничений 2020-2021 годов некоторая часть курсов, читаемых московскими преподавателями, продолжает читаться в дистанционном формате, что, несомненно, отрицательно сказывается на усвоении студентами учебного материала. В некоторой степени ситуацию удастся исправить, передавая часть (семинарскую, например, а иногда и часть лекционной) таких курсов также преподавателям из Душанбе. Проблема слабой материальной базы частично решается переносом практикумов по физике конденсированных сред и по неорганической химии на включенное обучение в Москве на 8 семестре. Тогда же (на включенном обучении) студенты выполняют и ВКР, которая при этом по объему оказывается заметно меньше, чем на московских факультетах МГУ. Отсутствие в душанбинском филиале магистратуры приводит к необходимости увеличивать в программе бакалавриата объем материаловедческих дисциплин (они читаются на 3, 5 и 7 семестрах, причем некоторые вопросы рассматриваются повторно, на более глубоком уровне изложения). Также по сравнению с московской образовательной программой в Душанбе увеличен (ввиду сложности предмета и важности его в целом для химии и физики твердого тела) объем курса структурной химии и кристаллохимии (три части курса читаются на 6, 7 и 8 семестрах).

Тем не менее, полученный уровень образования позволяет выпускникам филиала в Душанбе как работать на профильных предприятиях Таджикистана, так и продолжать обучение в магистратуре (в том числе, но не только на факультете наук о материалах МГУ), причем некоторые студенты после магистратуры заканчивают аспирантуру и защищают кандидатские диссертации.

**Термодинамика, кинетика и технология синтеза эпитаксиальных слоев
нанокарбида кремния на кремнии методом согласованного замещения атомов и его
уникальные свойства**

Кукушкин* С.А., Осипов А.В.

Институт проблем машиноведения РАН (ИПМаш РАН), Большой пр. В.О., д. 61, Санкт-Петербург, 199178 *Россия*

*e-mail: sergey.a.kukushkin@gmail.com, + 79112621Ë1702

В докладе излагаются основные принципы нового метода роста эпитаксиальных пленок нано-SiC на Si, основанного на согласованном замещении части атомов кремния в кристаллической решетке Si на атомы углерода [1-4]. Разработанный метод заключается в замене части атомов Si на C прямо внутри матрицы кремния, а не при помощи нанесения атомов на поверхность подложки, что существенно отличает его от классических схем роста тонких плёнок. По сути дела, впервые в мировой практике реализован метод согласованной замены атомов одного сорта другими прямо внутри исходного кристалла без разрушения его кристаллической структуры. Метод напоминает “генетический синтез” белковых структур в биологии. Метод позволяет решить одну из основных проблем гетероэпитаксии, а именно, осуществить синтез низкодефектных, ненапряженных эпитаксиальных пленок при большом различии между параметрами решетки пленки и подложки [1-4]. Качество структуры слоев, полученных данным методом, значительно превосходит качество пленок карбида кремния, выращенных на кремниевых подложках ведущими мировыми компаниями. Открытие данного метода позволяет прямо на кремниевой подложке синтезировать широкий спектр широкозонных материалов, что открывает беспрецедентные условия для создания нового типа приборов [5]. Приведено сравнение нового метода роста с классическими методами роста тонких пленок. Изложен термодинамический и кинетический анализ процесса замещения атомов в твердой фазе [1-6]. На примере образования SiC описаны механизмы протекания широкого класса гетерогенных химических реакций между газовой фазой и твердым телом. Показано, что на границе раздела SiC/Si при данном методе роста возникает интерфейсный слой с нестандартными оптическими и электрофизическими свойствами [3,6]. Необычные свойства вызваны схлопыванием (усадкой) материала, при котором карбид кремния, как новая фаза, отделяется от кремниевой матрицы. Кремний подвергается аномально сильному сжатию. В результате подобной усадки каждая пятая химическая связь SiC полностью согласуется с каждой четвертой связью Si, остальные связи деформируются. Показано, что давления сжатия, возникающие в тонком приграничном слое толщиной порядка нескольких нанометров, могут достигать величин порядка 200-250 GPa. Давления подобной величины приводят к образованию особых, ранее неизвестных, свойств границы раздела SiC(111)/Si(111). На примере образования SiC вскрыт механизм протекания широкого класса гетерогенных химических реакций между газовой фазой и твердым телом. Основным отличительным свойством пленок SiC, синтезированных данным методом, является образование в нем избыточной концентрации кремниевых вакансий, в то время как в SiC, выращиваемом по стандартным методикам, присутствуют в основном вакансии углерода. Взаимодействие углеродных атомов и кремниевых вакансий приводит к образованию в слоях SiC, упорядоченных ансамблей углеродно-вакансионных структур [2-4,6]. Подобные структуры образуются как вследствие химической реакции замещения, так и вследствие усадки кристаллической ячейки Si при ее превращении в кристаллическую ячейку SiC. Присутствие углеродно-вакансионных структур в SiC приводит к образованию в нем целого ряда новых уникальных оптических, электрических и магнитных свойств. Приводится описание обнаруженного явления фазового перехода носителей заряда в когерентное

состояние с одновременным возникновением гигантского значения диамагнетизма порядка $(1/4\pi)$, в слабых магнитных полях, что связывается с возникновением сверхпроводящего состояния [7,8].

Список литературы

1. S.A. Kukushkin and A.V. Osipov. Topical Review. Theory and practice of SiC growth on Si and its applications to wide-gap semiconductor films (Review)// J. of Phys. D: Appl. Phys. 47, 313001-313041 (2014). doi: <https://doi.org/10.1088/0022-3727/47/31/313001>.
2. С. А. Кукушкин, А. В. Осипов. Эпитаксиальный карбид кремния на кремнии. Метод согласованного замещения атомов (Обзор)// Журнал общей химии. Т. 92, № 4, с. 547–577 (2022). doi: <https://doi.org/10.1134/S1070363222040028>.
3. С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. Термодинамика, кинетика и технология синтеза эпитаксиальных слоев карбида кремния на кремнии методом согласованного замещения атомов и его уникальные свойства. (Обзор) // Конденсированные среды и межфазные границы. – (2022). Т. 24, вып. 4. – С. 407–458. – DOI: 10.17308/kcmf.2022.24/10549.
4. Grashchenko A.S., Kukushkin S.A., Osipov A.V., Redkov A.V. Vacancy growth of monocrystalline SiC from Si by the method of self-consistent substitution of atoms// Catal. Today. (2022); 397–399(8): 375–378. DOI: 10.1016/J.CATTOD.2021.08.012.
5. S. A. Kukushkin, L. K. Markov, A. S. Pavlyuchenko, I. P. Smirnova, A. V. Osipov, A. S. Grashchenko, A. E. Nikolaev, A. V. Sakharov, A. F. Tsatsulnikov, G.V. Sviatets. SiC/Si Hybrid Substrate Synthesized by the Method of Coordinated Substitution of Atoms: A New Type of Substrate for LEDs // Coatings, 2023, Vol. 13, p. 1142. pp.1-17. DOI:10.3390/coatings13071142
6. S.A. Kukushkin, A.V. Osipov. Spin Polarization and Magnetic Moment in Silicon Carbide Grown by the Method of Coordinated Substitution of Atoms // Materials. – 2021. – V. 14, No. 19. – P. 5579. – DOI: 10.3390/ma14195579.
7. Н.Т. Баграев, С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, В.В. Романов, Л.Е. Клячкин, А.М. Маляренко, В.С. Хромов. Магнитные свойства тонких эпитаксиальных слоев SiC, выращенных методом самосогласованного замещения атомов на поверхностях монокристаллического кремния // Физика и техника полупроводников. – 2021. – Т. 55, вып. 2. – С. 103–111. – DOI: 10.21883/FTR.2021.02.50493.9538.
8. Н.Т. Баграев, С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, В.Л. Уголков. Фазовые переходы в эпитаксиальных слоях карбида кремния, выращенных на кремниевой подложке методом согласованного замещения атомов // Физика и техника полупроводников. – 2022. – Т. 56, вып. 7. – С. 715–718. – DOI: [10.21883/FTR.2022.07.52766.24](https://doi.org/10.21883/FTR.2022.07.52766.24)

Атомное картирование распределений химических элементов в наноструктурах материалов методом атомно-зондовой томографии

С. В. Рогожкин^{а,б,*}, А. А. Лукьянчук^{а,б}, О. А. Разницын^{а,б}, А. С. Шутов^{а,б}, А. А. Никитин^{а,б}, А. А. Хомич^{а,б}, Н. А. Искандаров^{а,б,*}, А. В. Клауз^{а,б}

^а*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, 115409
Россия*

^б*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Воронеж, 123182
Россия*

*e-mail: SVRogozhkin@mephi.ru; sergey.rogozhkin@itep.ru, +74997896374

В настоящее время наиболее перспективные материалы и системы имеют особенности структуры на уровне размеров в несколько нанометров. Продвижение этих разработок в значительной мере сопряжено с развитием методик, позволяющих контролировать состояние материалов на этих масштабах. Наиболее сложной проблемой является одновременная характеристика пространственных особенностей и химического состава на масштабах близких к атомным. Именно в этой области размеров наиболее совершенной методикой является атомно-зондовая томография (АЗТ, atom probe tomography в англоязычной литературе) [1]. Важнейшим направлением применения АЗТ является анализ наноструктурированных многокомпонентных материалов, в том числе сложнолегированных сталей в исходном состоянии и после различных воздействий/обработок). При этом значимые перестройки химического состава протекают на масштабах нанометров и зачастую не регистрируются другими методиками ультрамикроскопии.

АЗТ включает в себя проекционный микроскоп (аналогичный автоионному микроскопу) и времяпролетный масс-спектрометр. В настоящем докладе демонстрируются возможности атомно-зондовых томографов с лазерным испарением, разработанных авторами работы. Представлены результаты исследований на томографах ПАЗЛ-3D с фемтосекундным лазерным испарением, АТЛАЗ и АтоТом с пикосекундным лазерным испарением. Демонстрируются возможности АЗТ установок на примере ферритно-мартенситных сталей, дисперсно-упрочненных оксидами сплавов, жаропрочном никелевом сплаве, сплавах алюминия, высокоэнтропийных сплавах. Также представлен ряд результатов исследования влияния облучения на материалы конструкционные материалы ядерных реакторов.

1. Miller M.K. Atom Probe Tomography. New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers. 2000. 239 p.
2. Рогожкин С. В. и др. // Приборы и Техника Эксперимента. 2017. №3. С. 129-134. doi: 10.7868/S0032816217020227
3. Лукьянчук А. А. и др. // Ядерная физика и инжиниринг. 2022. Т. 13. № 4. С. 344–350. doi: 10.56304/S2079562922010262

Мемристивные структуры М/НК/Д1/Д2/М на их основе нанокompозитов CoFeB-SiO₂, CoFe-SiO₂, Co-SiO₂

А.В. Ситников, А.Р. Шакуров, Ю.Е.Калинин, И.В. Бабкина, А.Е. Никонов, Е.А. Осипов

Воронежский Государственный Технический Университет, РФ, Воронеж

e-mail: sitnikov04@mail.ru, +79192411201

В настоящее время, одно из амбициозных и наиболее активно развиваемых направлений в мире, в области конвергентных наук и информационных технологий, связано с разработкой аппаратных нейроморфных вычислительных систем (НВС), которые существенно (на порядки) более эффективны при малом энергопотреблении для решения когнитивных задач (распознавания образов и речи, планирования, принятия решений, прогнозирования и т.д.), чем современные вычислительные системы, базирующиеся на архитектуре фон Неймана. В этом отношении НВС на основе мемристивных матриц обладают существенным преимуществом, поскольку для моделирования синапса используется всего один резистивный элемент, способный под действием электрических импульсов изменять и сохранять свое сопротивление в некотором окне между высокоомным (R_{off}) и низкоомным (R_{on}) резистивными состояниями. Наиболее перспективными мемристивными элементами в настоящее время являются структуры конденсаторного типа металл-диэлектрик-металл (Me/Д/Me). Однако в них образование проводящих каналов в Д связано с дефектами на интерфейсе Me/Д. Поэтому возникает эффект нестабильности переключений, разброс параметров мемристоров от элемента к элементу, высокие напряжения при формовке образцов. Наш подход, позволяющий решить данные проблемы, заключается в использовании нанокompозитов (НК) металл-диэлектрик состава до порога перколяции в качестве материала электрода. При этом за счет каналирования протекания тока в НК появляется возможность формировать много филаментную структуру проводимости в функциональном слое мемристора. Данный подход позволяет стабилизировать резистивные характеристики мемристивных элементов за счет статистического характера проводимости, индуцировать множество резистивных состояний между R_{off} и R_{on} (пластичность РП), реализовать нелинейность ВАХ в области низкоомных резистивных состояний мемристивного элемента за счет эффекта перераспределения электрического потенциала между проводящими каналами в диэлектрике и нанокompозите, актуализировать режим мягкого формования, уменьшить требования к качеству диэлектрического покрытия структур.

В ходе выполнения работы методом ионно-лучевого распыления с использованием теневых масок были получены и исследованы мемристивные структуры Cu/(Co₄₀Fe₄₀B₂₀)_x(SiO₂)_{100-x}/LiNbO₃/Cr/Cu/Cr/ситалл, Cu/(Co₄₀Fe₄₀B₂₀)_x(SiO₂)_{100-x}/LiNbO₃/α-Si/Cr/Cu/Cr/ситалл, Cu/(Co₄₀Fe₄₀B₂₀)_x(SiO₂)_{100-x}/LiNbO₃/Ta₂O₅/Cr/Cu/Cr/ситалл, Cu/(Co₄₀Fe₄₀B₂₀)_x(SiO₂)_{100-x}/ZrO₂(Y)/Cr/Cu/Cr/ситалл, Cu/(Co₅₀Fe₅₀)_x(SiO₂)_{100-x}/ZrO₂(Y)/Cr/Cu/Cr/ситалл, Cu/(Co_x)_x(SiO₂)_{100-x}/ZrO₂(Y)/Cr/Cu/Cr/ситалл, Cu/(Co₄₀Fe₄₀B₂₀)_x(SiO₂)_{100-x}/ZrO₂(Y)/Ta₂O₅/Cr/Cu/Cr/ситалл и Cu/(Co₄₀Fe₄₀B₂₀)_x(SiO₂)_{100-x}/ZrO₂(Y)/Nb₂O₅/Cr/Cu/Cr/ситалл. Экспериментально показана универсальность подхода формирования многофиламентного резистивного переключения в пленках оксидов металла при использовании в качестве электрода нанокompозит металл-диэлектрик составом до порога перколяции. Обнаружена стабилизация проводящих филаментов в ZrO₂(Y) в процессе обратимого резистивного переключения при наличии атомов В в составе НК, которая может быть связана с взаимодействием атомов бора с Zr в кислородных вакансиях. Определяющий механизм проводимости в исследуемых мемристивных структурах - надбарьерная эмиссия электронов с последующим переносом носителей через пленку (эффект Шотки), а при добавлении α-Si – туннельная инжекция Фаулера-Норгейма через самоорганизующуюся пленку SiO₂. Работа выполнена при поддержке РФФИ в рамках проекта №25-29-00215

**Физика и химия формирования межслоевых областей
в нейтронных и рентгеновских зеркалах**

Е. О. Филатова

*Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, 199034
Россия*

**e-mail: elenaofilatova@mail.ru, +79213334387*

Переход к наномасштабу является ключевым вектором развития современных технологий. Создание многослойных наносистем требует внедрения передовых методов диагностики химического и атомного состава. При уменьшении толщины слоев определяющую роль начинают играть явления на межфазовых границах — взаимная диффузия и химические реакции. Они способствуют образованию переходных интерслоев, которые ухудшают оптические свойства рентгеновских и нейтронных зеркал, снижая их коэффициент отражения и спектральное разрешение. Одним из наиболее эффективных способов подавления этих нежелательных диффузионных процессов является внедрение ультратонких барьерных слоев.

Метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) высокоэффективен при анализе многослойных систем, поскольку позволяет выявлять скрытые межфазовые границы. Тем не менее, его применение имеет ограничения из-за малой глубины зондирования. В зависимости от энергии фотонов, этот параметр составляет от 10 нм для лабораторных приборов до 30 нм для источников синхротронного излучения. В связи с этим возникает закономерный вопрос: насколько данные, полученные лишь для двух верхних периодов, репрезентативны для всей структуры. Будут рассмотрены результаты дифракционного анализа, дающего информацию о всей системе в целом. Показана полная корреляция данных, получаемых поверхностно чувствительным методом РФЭС и объемным методом РД. Также встает вопрос об эффективности РФЭС применительно к системам, в которых взаимодействие слоев отсутствует. Будут рассмотрены бонусы метода применительно к системам обоих типов (не/взаимодействующих слоев). Будут проанализированы способы оптимизации таких структур и контроля толщины переходных зон посредством внедрения барьерных слоев и нитридации.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 26-12-00065.

**Ультразвуковая резонансная спектроскопия
и ее применение для исследования материалов**

Г. В. Афонин, В. А. Хоник*,

*ФГБОУ ВО Воронежский государственный педагогический университет, Воронеж,
394043 Россия*

**e-mail: v.a.khonik@yandex.ru*

Резонансная ультразвуковая спектроскопия (РУС) — это высокоточный неразрушающий метод исследования материалов, основанный на анализе их собственных механических резонансов. Метод позволяет с высокой точностью и на одном образце малого размера определить полный набор упругих постоянных материала, которые являются чувствительными индикаторами его атомной структуры и межатомных сил. Кроме того, можно рассчитать величину внутреннего трения.

Суть метода заключается в измерении спектра собственных частот механических колебаний образца и последующем решении обратной задачи для определения упругих свойств материала. Процесс включает два этапа.

Эксперимент: Образец правильной геометрической формы (чаще всего параллелепипед) помещается между двумя ультразвуковыми преобразователями. Один преобразователь возбуждает образец в широком диапазоне частот, а второй регистрирует его резонансный отклик. В результате получается резонансный спектр, на котором пики соответствуют собственным частотам колебаний образца.

Вычисления (решение обратной задачи): на основе известной геометрии, плотности образца и начальных приближений для упругих констант вычисляется теоретический резонансный спектр («прямая задача»). Затем, путем итерационного сравнения теоретического и экспериментального спектров, подбираются такие значения упругих констант, при которых совпадение спектров становится наилучшим.

РУС обладает рядом важных преимуществ перед традиционными методами (например, ультразвуковым импульсным методом или методом "напряжение-деформация"). Это, во-первых, это высокая точность определения упругих констант. Во-вторых, это полнота данных: метод позволяет за одно измерение получить все независимые упругие постоянные материала. Реализация метода РУС в условиях нагрева позволяет не только определить температурную зависимость упругих модулей (в особенности модуля сдвига), но и с высокой точностью определить внутреннее трение. В-третьих, метод РУС отлично пригоден для исследования небольших образцов, которые сложно изучать другими способами. В-четвертых, метод применим к широкому спектру материалов (проводящих, диэлектрических, магнитных и др.).

В докладе особое внимание уделяется применению методики РУС к изучению некристаллических материалов.

Закономерности и механизмы инициируемых воздействием лазерных импульсов структурных и фазовых превращений в приповерхностных слоях и их влияние на свойства металлических материалов

^{1,2} Колобов Ю.Р.

¹*ФИЦ проблем химфизики и медицинской химии РАН, г. Черноголовка, 142432 Россия*

²*Московский госуниверситет им. М. В. Ломоносова, г. Москва, Россия*

**e-mail: kolobov@icp.ac.ru, +74965221320*

Доклад посвящен анализу современного состояния важной для практического использования научной проблемы целенаправленной модификации структуры и свойств поверхности и тонких приповерхностных слоев металлов, сплавов и композитов на их основе с использованием импульсного лазерного облучения [1] и использованию результатов исследований в курсе лекций «Основы инженерного и цифрового материаловедения», читаемого студентам МГУ им. М.В.Ломоносова.

Методами оптической металлографии, конфокальной лазерной и просвечивающей (в том числе высокоразрешающей) электронной микроскопии, рентгеноструктурного анализа и другими в сочетании с изучением механических свойств и компьютерным моделированием исследованы закономерности и физические механизмы наноструктурирования и фазово - структурных превращений в приповерхностных слоях металлических материалов с ГПУ-, ГЦК- и ОЦК кристаллическими решетками. в условиях воздействия лазерными импульсами с короткой (наносекундной) и ультракороткой (фемтосекундной) длительностью и различными энергией, частотой следования импульсов. На примере титана (сплав ВТ1-0) обнаружено, что под действием фемтосекундного лазерного импульса, вызывающего сдвиговую деформацию на фронте ударной волны в определенных условиях, инициируется механическое («холодное») плавление с последующей кристаллизацией и формированием нанокристаллической структуры [2]. Использование импульсной лазерной обработки позволяет целенаправленно сформировать локальные или покрывающие всю внешнюю поверхность опытных образцов/изделий области с мощным дисперсным упрочнением за счет инициированного ударной волной выделения частиц ГЦК-карбидов титана. Проведено компьютерное моделирование формирования поверхностного рельефа на объемных образцах применяющейся для изготовления лазерных зеркал бескислородной меди при циклическом импульсном термомеханическом нагружении воздействием лазерных импульсов в доабляционном режиме [3]. Проанализировано влияния лазерной обработки импульсами фемто- и наносекундной длительности (в сравнении с соответствующим для плазменно - электролитической обработки) на структуру приповерхностных слоёв, фазовый состав и механические свойства титановых сплавов медицинского применения (ВТ1-0, ВТ6). Обнаружено снижение циклической прочности пластинчатых образцов после проведения ПЭО, в отличие от кратного повышения сопротивления усталостному разрушению пластинчатых образцов толщиной до 1 мм.

[1] Kolobov, Yu.R. // Russian Physics Journal. – 2018. – Т. 61. – №. 4. – С. 611-623.

[2] Zhakhovsky V., Kolobov Yu., Ashitkov S., et all // Physics of Fluids. – 2023. – Vol. 35. No.9.– p. 096104.

[3] Nelasov, I. , Manokhin, S. Kolobov Yu., et all. // J. Appl. Phys. - 2026. - Vol.141- accepted for publication.

Работа выполнена по теме Государственного задания FFSG-2024-0018, № государственной регистрации - 124020700089-3.

Новые высокоэнтропийные сплавы медицинского назначения на основе Ti

В.К. Жидков^{*1}, М.А. Каплан¹, Я.А. Морозова¹, А.Г. Колмаков, М.А. Севостьянов¹

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук, Москва, 119334 Россия

^{*}Email: vkzhidkov@yandex.ru, Телефон: +79162950481

Современные медицинские сплавы на основе Ti обладают рядом существенных ограничений. К ним относятся токсичность таких элементов, как ванадий и алюминий, а также повышенная жесткость материалов, которая приводит к проблеме «экранирования». В связи с этим в последнее время научные исследования направлены на поиск новых биоинертных сплавов с модулем упругости близким к модулю кости человека. [1] Одним из предлагаемых решений называют высокоэнтропийные сплавы (ВЭС). ВЭС на основе титана обладают низкой жесткостью, а также возможностью тонкой настройки свойств за счет изменения соотношения элементов. Данная работа на исследование фазового состава, микроструктуры и механических свойств двух перспективных высокоэнтропийных сплавов систем Ti–Zr–Hf–Nb–Sn с содержанием Sn 3 ат. % (составы 44Ti–22Zr–22Hf–9Nb–3Sn и 45Ti–22,5Zr–22,5Hf–7Nb–3Sn).

Было показано, что сплавы системы Ti–Zr–Nb–Hf с добавлением 1-5 ат. % Sn обладают меньшим модулем упругости (до 50-70 ГПа) по сравнению с нелегированными аналогами. [2] Также легирование оловом может приводить как к упрочнению твердого раствора, так и, при определенных режимах термической обработки, к выделению упрочняющих наночастиц (к примеру, на основе α -фазы или интерметаллида Ti_3Sn). Такие эффекты уже неоднократно фиксировались в классических β -титановых сплавах [3], а для ВЭС их изучение только начинается. В связи с вышеизложенной информацией изучение составов 44Ti–22Zr–22Hf–9Nb–3Sn и 45Ti–22,5Zr–22,5Hf–7Nb–3Sn выглядит актуальным направлением поиска новых медицинских материалов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-00873, <https://rscf.ru/project/25-23-00873/>.

[1] Pesode P., Barve S. A review—metastable β titanium alloy for biomedical applications // Journal of Engineering and Applied Science. 2023. Vol. 70. № 1. P. 1–36. DOI: 10.1186/S44147-023-00196-7.

[2] Yang W., Pang S.J., Wang G., Liu Y., Liaw P.K., Zhang T. Ti–Zr–Hf–Nb–Ta–Sn high-entropy alloys with good properties as potential biomaterials // Rare Metals. 2022. Vol. 41. № 7. P. 2305–2315. DOI: 10.1007/S12598-021-01938-3/METRICS.

[3] Li S., Rehman I.U., Lim J.H., Lee W.T., Seol J.B., Kim J.G., Nam T.H. Effect of Sn content on microstructure, texture evolution, transformation behavior and superelastic properties of Ti–20Zr–9Nb–(2–5)Sn (at.%) shape memory alloys // Materials Science and Engineering: A. 2021. Vol. 827. P. 141994. DOI: 10.1016/J.MSEA.2021.141994.

Трехмерная характеристика поверхностей в РЭМ: микрофотограмметрия и стереореконструкция

Е.Б. Модин

CIC nanoGUNE, Donostia–San Sebastián, Spain
E-mail: e.modin@nanogune.eu

Трехмерная характеристика поверхности становится одной из ключевых задач современной электронной микроскопии. В отличие от традиционных двумерных СЭМ-изображений, трехмерные модели позволяют выполнять количественные измерения геометрии поверхности, шероховатости, объемов дефектов и пространственного распределения материала, что востребовано в материаловедении, микроэлектронике, биологии и инженерии.

В работе представлены разработанные в нашей лаборатории методы трехмерной реконструкции поверхности и формы различных микрообъектов средствами сканирующей электронной микроскопии. Используются два взаимодополняющих подхода: фотограмметрия и стереоскопическая реконструкция.

Автоматизированный сбор изображений выполняется на сканирующем микроскопе Tescan Amber X с использованием Python-скриптов на базе SharkSEM Advanced. Трехмерные модели строятся методом Structure-from-Motion в AliceVision Meshroom и Agisoft Metashape. Также исследуется применение Neural Radiance Fields (NeRF) и семейство нейросетевых моделей Depth Anything, для восстановления карты глубины по одному изображению РЭМ изображению.

Основное внимание уделено разработанному программному комплексу стереоскопической реконструкции, определяющему профиль поверхности по двум, СЭМ-изображениям, полученным при углах наклона (например, $\pm 5^\circ$). В отличие от известных алгоритмов и коммерческих решений, программа поддерживает обработку гигапиксельных изображений, обеспечивая количественную оценку топографии миллиметровых областей при нанометровом разрешении в диапазоне пространственных масштабов, необходимом для определения параметров шероховатости согласно ISO 4287:1997.

Особый интерес представляет интеграция стереоскопической реконструкции с трехмерным химическим картированием. Восстановленный рельеф используется для коррекции глубинного профилирования ToF-SIMS с учетом реальной геометрии поверхности при пересчете глубины распыления. Последовательные стереоскопические реконструкции после цикла травления позволяют выполнять количественный анализ удаленного материала и строить трехмерные модели распределения химического состава с существенно более высокой геометрической точностью.

Томография обратного пространства является одним из наиболее эффективных методов определения кристаллической структуры в электронной микроскопии. Совмещение 3D электронной дифракционной (ED) томографии с методом 4D STEM открывает возможности для картирования изменений кристаллической структуры с пространственным разрешением в несколько нанометров [1]. Однако при исследовании поликристаллических образцов возникает проблема перекрытия обратных пространств нескольких кристаллов. В таких случаях стандартные методы определения фаз неприменимы, а разделение вкладов отдельных кристаллов осложняется фазовой проблемой и динамическими эффектами рассеяния.

Одним из перспективных подходов к решению этой задачи является применение методов искусственного интеллекта (ИИ). Однако обучение ИИ требует большого объема стандартизированных и размеченных данных. Использование полных трехмерных наборов данных связано с высокими вычислительными затратами, поэтому необходимы более простые представления, сохраняющие ключевую информацию о структуре кристалла.

В данной работе предлагается использовать цилиндрические проекции трехмерного обратного пространства в качестве двумерного представления данных. Они сохраняют информацию о симметрии и ориентации кристалла, позволяют восстанавливать взаимную ориентацию кристаллов при перекрытии дифракционных картин и существенно снижают вычислительную сложность по сравнению с трехмерными данными.

Сравнение экспериментальных и смоделированных цилиндрических проекций кварца показало, что положения дифракционных рефлексов воспроизводятся с высокой точностью. При этом различия в распределении интенсивностей, обусловленные динамическими эффектами, снижают коэффициент взаимной корреляции до 0,63. Это указывает на необходимость учета динамического рассеяния при создании практически применимых моделей ИИ, хотя для первичной оценки возможностей алгоритмов кинематическое приближение остается достаточным.

В настоящей работе предложенный подход использован для исследования возможностей сверточных нейронных сетей при разделении обратного пространства двух кристаллитов одной фазы, повернутых относительно друг друга. Показано, что архитектура сверточных нейронных сетей недостаточно эффективно учитывает глобальный контекст, тогда как корректное предсказание интенсивностей дифракционных рефлексов требует анализа всей дифракционной картины.

1. Eggeman, A., Krakow, R. and Midgley, P. // Nat Commun. 2015. V. 6. P. 7267. doi: 10.1038/ncomms8267

Биокерамика сложного химического состава: высокоэнтروпийные материалы для регенерации костной ткани

В.И. Путляев^{а,б,*}, П.В. Евдокимов^{а,б}, А.В. Гаршев^{а,б,в}, Е. С. Климашина^{а,б},
Я.Ю. Филиппов^{б,г}, Н.В. Леонтьев^{а,б}, Д.О. Голубчиков^{а,б}, А. М. Мурашко^{а,б}

^а Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва, 119991 Россия

^б Факультет наук о материалах МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва, 119991 Россия

^в Университет МГУ-ППИ, Шэньчжэнь, Китай

^г Институт механики МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва, 119991 Россия

*e-mail: valery.putlayev@gmail.com, +74959392469

Реконструкция костной ткани с помощью макропористой (стекло)керамики, имеющей сложный химический состав и архитектуру – активно развивающееся направление современной тканевой инженерии. Рассмотрено использование материалов на основе фосфатов кальция, модифицированных различными неорганическими ионами, в контексте улучшения остеоиндуктивных свойств внутрикостных имплантатов. Особого внимания заслуживает положительный эффект некоторых переходных металлов, которые не только усиливают остеогенез и обладают антибактериальными свойствами, но и стимулируют ангиогенез и васкуляризацию, что имеет решающее значение для образования кровеносных сосудов. В качестве базовой кристаллической структуры, способной обеспечить обширный изоморфизм и резорбируемость (растворимость) рассматривается высокотемпературная модификация глазерита, $X^{[6+6]}Y_2^{[4+6]}M^{[6]}(EO_4)_2$, которая позволяет проводить замещения в четырех группах позиции структуры обширного набора химических элементов.

Сложный химический состав способствует энтروпийной стабилизации высокотемпературной фазы, представляя еще один пример современных высокоэнтропийных материалов. Усложнение химического состава при допировании, в основном, в позициях структуры Е и М увеличивает энтропию соединения за счет увеличения вклада конфигурационной энтропии при образовании твердого раствора. В докладе обсуждаются керамические и стеклокерамические материалы (в том числе, на основе канонического состава биостекла 45S5), содержащие до 20 различных элементов; влияние состава на фазовые превращения и спекаемость, резорбируемость, рН при гидролизе в водной среде. Отдельно рассмотрен вопрос создания остеокондуктивной макропористой керамики заданной архитектуры из порошков обсуждаемых сложных составов с помощью стереолитографической 3D печати.

Доклад подготовлен авторским коллективом в рамках теоретических и экспериментальных работ при финансовой поддержке гранта РНФ № 22-19-00219-П с использованием оборудования, приобретенного за счет Программы развития Московского университета.

УДК 546.98

Спектроскопия характеристических потерь энергии электронов как метод исследования локальной структуры и состава материалов

А. М. Абакумов*

АНОО Сколковский институт науки и технологий, 121205 Россия

**e-mail: a.abakumov@skoltech.ru, +74952801481*

Современная просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ) предоставляет широкие возможности для исследования локальной структуры, от количественного определения кристаллической структуры при помощи электронной дифракции до ее непосредственной визуализации с субангстремным пространственным разрешением. В дополнение к кристаллографической информации, химическая информация может быть извлечена из спектроскопических данных, полученных благодаря неупругим взаимодействиям электронов высоких энергий с веществом. Спектроскопия характеристических потерь энергии электронов (СХПЭЭ, EELS) является одним из наиболее распространенных аналитических методов, реализованных в ПЭМ. Энергетическое положение и распределение интенсивности основных краев элементов в спектрах СХПЭЭ зависят от степени окисления и координационного числа и могут быть использованы для картирования этой химически чувствительной информации в различных пространственных масштабах и даже с атомным разрешением в режиме сканирующей ПЭМ (СПЭМ) с корректором аберраций. Использование монохроматора электронного пучка позволяет достичь энергетического разрешения до ~ 0.1 эВ и наблюдать тонкую структуру основных краев.

В докладе будут показаны возможности и примеры использования СХПЭЭ для картирования химического состава (в т.ч. получения пространственных карт распределения лития и бора) и координационного окружения с атомным разрешением, определения и картирования степени окисления переходных металлов, типа химической связи углерода и присутствия функциональных карбонильных, карбоксильных и карбонатных групп.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 23-73-30003).

**Стабилизация межфазовых границ в многослойных зеркалах Ru/B₄C
с помощью углеродных барьерных слоёв**А. В. Бугаев^{а,*}, С. С. Сахоненков^а, Е. О. Филатова^а^а *Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, 199034
Россия**e-mail: bugaev.sasha99@mail.ru, +79681858807

Многослойные интерференционные зеркала на основе Ru/B₄C являются перспективными элементами оптических систем для литографии на длине волны 6.7 нм (BEUV). Однако экспериментальная отражательная способность таких систем (~30%) значительно уступает теоретическим расчётам (~70%). Основная причина – образование протяжённых переходных слоёв на межфазовых границах вследствие взаимодиффузии компонентов и химического взаимодействия с формированием боридов рутения.

Методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (XPS), дифрактометрии (XRD) и рентгеновской рефлектометрии (XRR) исследованы многослойные структуры [Ru/B₄C]₅₀ с различными значениями параметра Γ (отношение толщины Ru к величине периода) – 0.23 и 0.45. Показано, что изменение Γ существенно влияет на химический состав межфазовых областей. При большем содержании Ru ($\Gamma = 0.45$) на границе преобладают бориды одного типа, тогда как уменьшение Γ до 0.23 (утолщение слоя B₄C) приводит к образованию соединений различных стехиометрий. Кроме того, тонкий слой Ru (0.78 нм) при $\Gamma = 0.23$ не обеспечивает защиту от окисления, о чём свидетельствует рост сигнала оксида бора.

Были проанализированы результаты исследования многослойной структуры [Ru/B₄C]₅₀ с параметром $\Gamma = 0.45$ с ультратонким барьерным слоем углерода (0.3 нм), нанесённым на межфазовую границу Ru-на-B₄C. Углерод, в качестве барьерного слоя, уже положительно зарекомендовал себя с другими многослойными системами, например в системе La/B₄C [1]. По данным XPS, в системе с барьером значительно подавляется образование боридов. Таким образом, углерод успешно предотвращает межслоевое смешение.

Также была изучена термическая стабильность при отжиге при 400°C в течение 1 часа. В структуре без барьера отжиг вызывает активную взаимодиффузию, рост количества боридов и окисление поверхностных слоёв, что говорит о низкой термической устойчивости. Напротив, образец с углеродной прослойкой практически не изменяет химического состояния границ после отжига. Наблюдается лишь перераспределение кислорода с образованием оксида бора в глубине структуры. Данные XRR подтверждают этот вывод: толщина переходной области (параметр s) в системе с барьером уменьшается на 0.22–0.24 нм по сравнению с образцом без барьера.

Таким образом, использование углеродных барьерных слоёв позволяет существенно повысить структурную и термическую стабильность многослойных зеркал Ru/B₄C, что критически важно для их применения в условиях длительного облучения высокой интенсивности. Результаты открывают путь к повышению реальной отражательной способности таких систем и их внедрению в оптику следующего поколения.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 26-12-00065.

1. Polkovnikov V. N., Salashchenko N. N., Starikov S. D., Chkhalo N. I. High performance multilayer La/B₄C mirrors with carbon barrier layers // Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. – 2014. – V. 78, № 1. – P. 61–63.

Электронная микроскопия пленок NiO, легированных Fe

А. Л. Васильев*, Э. М. Пашаев, И. А. Субботин, И. Н. Трунькин

НИЦ «Курчатовский институт» Москва, 123182 Россия

*e-mail: a.vasiliev56@gmail.com, +79104130115

Оксид никеля широко используется в антиферромагнитной спинтронике в качестве модельного материала, в том числе из-за высокой температуры Нееля $T_N = 523$ К и ярко выраженной магнитной анизотропии. В тонкопленочных структурах возможно управление спин-зависимыми свойствами с помощью магнитного, электрического [1] и деформационного полей. Возможность влияния на магнитную анизотропию за счет деформационных воздействий при изменении толщины буферного и функционального слоев была продемонстрирована в [2] для структур на основе Fe/NiO, сформированных на различных подложках.

В работе методами электронной микроскопии, энергодисперсионного рентгеновского микроанализа и рентгеновской дифракции исследована структура тонких пленок (FeNi)O, полученных магнетронным распылением, на подложках (0001) α -Al₂O₃.

Обнаружено, что в процессе послеростовой термообработки в пленке формируются нанокристаллиты герцинита FeAl₂O₄, которые в самых тонких пленках занимают всю толщину пленки, а в более толстых пленках локализуются на границе раздела NiO– α -Al₂O₃, межзеренных границах и поверхности пленки (Рис. 1). Формирование герцинита происходит за счет взаимной диффузии Al из подложки и Fe из пленки. Растягивающие напряжения от подложки и сжимающие напряжения от островков NiO могут изменять параметры элементарной ячейки герцинита, параметры кубической ячейки NiO разной толщины остаются неизменными.

Анизотропия кристаллической решетки магнитных материалов может служить ключевым фактором, определяющим их магнитные характеристики за счет изменения симметрии решеток антиферромагнетиков и модификации кристаллического поля и электронной структуры, что влечет за собой изменение температур фазовых переходов, ориентации осей легкого намагничивания и критических полей спиновых переходов. Обнаруженные в результате термообработки структурные изменения тонких пленок (Ni,Fe)O могут быть использованы как инструмент направленного деформационного дизайна подсистем с межслоевыми границами в наноструктурах антиферромагнитной спинтроники на основе тонких пленок оксида никеля, допированного железом.

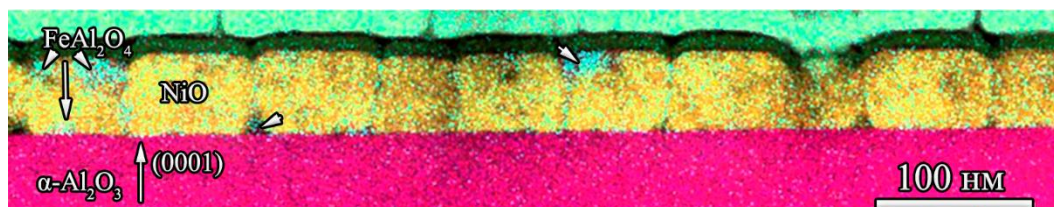


Рис. 1. Карта распределения элементов, полученная методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии в пленке (NiFe)O после отжига, стрелками показаны выделения герцинита FeAl₂O₄.

1. Zhang Y.J., Chen J.H., Li L.L. et al. // Phys. Rev. B. 2017. V. 95. № 17. P. 174420. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95>.

2. Janus W., Ślęzak T., Ślęzak M. et al. // Sci. Rep. 2023. V. 13. № 1. P. 4824. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-31930-z>

Учёт шероховатости поверхности электроосажденных медных покрытий в кинетике катодного восстановления нитрат-иона

Ф. А. Вдовенков*, О. А. Козадеров, П. П. Тараканов

*ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия***e-mail: f.vdovenkov@gmail.com*

Эффект шероховатости может приводить к изменению не только экстенсивных, но и интенсивных кинетических параметров нестационарных гетерогенных процессов. Для корректной оценки скорости реакции требуется учитывать геометрический фактор увеличения поверхности. Однако в общем случае такой учёт не является тривиальным, поскольку зависит от природы и характера кинетических ограничений. В нашей работе [1] предложен подход к учёту шероховатости поверхности металлического электрода в кинетике нестационарных электрохимических процессов, протекающих в режиме смешанного диффузионно-кинетического контроля. Для определения константы скорости переноса заряда необходимо провести регрессионный анализ опытных хроноамперограмм путем их сопоставления с выражением для кривой спада плотности тока шероховатого электрода:

$$i(t)_{\text{rough}} = nFkc \cdot \exp\left(\frac{k^2 t}{D}\right) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{kt^{0.5}}{D^{0.5}}\right) \cdot \varphi\left(\frac{k\lambda}{D}, f_r, t\right)$$

где n – число электронов; F – константа Фарадея; k – константа скорости переноса заряда; c – объемная концентрация; D – коэффициент диффузии; f_r – фактор шероховатости; φ – функция шероховатости; λ – расстояние между соседними неровностями на поверхности электрода; t – время поляризационных измерений.

Подход апробирован на примере катодного восстановления нитрат-иона в растворе 10 мМ $\text{KNO}_3 + 0.1 \text{ М H}_2\text{SO}_4$ при потенциостатических условиях поляризации на электроосажденных медных покрытиях с варьируемой шероховатостью, которые получали гальваническим осаждением из подкисленного раствора сульфата меди (II) и растворов на его основе с добавлением различных добавок: полиэтиленгликоль (300, 1500, 4000 г/моль), кватернизированный поливинилпиридин (300000 г/моль), динатриевая соль 4,4-дитиобензолдисульфоновой кислоты, 2-аминобензотиазол.

Для регрессионного анализа i, t -кривых определяли f_r методом электроосаждения монослоя свинца при недонапряжении с учётом кристаллографической ориентации по данным рентгеноструктурного анализа, а среднее расстояние между соседними неровностями определяли методом атомно-силовой микроскопии. Анализ полученных данных позволяет заключить, что рост средней шероховатости сопровождается увеличением кинетических параметров катодного восстановления нитрат-иона. Такое поведение может быть обусловлено различными причинами, включая изменение структуры поликристаллического образца с выходом на поверхность более каталитически активных кристаллических граней, увеличение числа активных адсорбционных центров, а также рост дефектности поверхности образца.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2025-2027 годы, проект № FZGU-2025-0001.

1. Вдовенков Ф.А. // Конденсированные среды и межфазные границы. 2025. Т. 27, № 4. С. 592-605. doi: 10.17308/kcmf.2025.27/13297.

М.А. Гадебская^{а,*}, М.А. Васильев^а, В.А. Крысанов^а

ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия

**e-mail: mgadebskaya@mail.ru, +7 (073)2208538*

В работе методом химического осаждения с использованием сильных восстановителей – щелочных растворов боргидрида натрия, дитионита натрия, а также гидразина, синтезированы серебросодержащие нанокомпозиты (НК) Ag⁰·Lewatit K2620.

Полученные образцы были изучены методом рентгеноструктурного анализа (РСА) с целью определения размера частиц серебра в порах ионообменной матрицы. Исходя из полученных дифрактограмм для эталонного материала и исследуемых образцов по уравнению Селякова-Шеррера рассчитали диаметр осажденного серебра. Рентгенографические исследования показали, что средний размер частиц осаждённого серебра в исследуемых образцах находится в интервале от 16 до 30 нм, что подтверждает наноструктурное состояние металлической фазы в составе композита независимо от природы использованного восстановителя.

В режиме сканирующего электронного микроскопа Tescan MIRA 3 LMN (Чехия) во вторичных электронах (SE) была изучена морфология поверхности серебросодержащих нанокомпозитов. Установлено, что природа восстановителя оказывает определяющее влияние на структурно-морфологические особенности металлического компонента. При использовании боргидрида натрия поверхность характеризуется высокой плотностью металлической фазы с обширными проводящими областями. В случае дитионита натрия изолированные наночастицы на поверхности не обнаружены, частицы серебра распределены без образования крупных агломератов, что указывает на более контролируемый характер процесса осаждения, обусловленный менее активной восстановительной способностью дитионита натрия, обеспечивающей постепенное зародышеобразование без значительной агломерации. При синтезе с использованием гидразина визуализируются отдельные крупные ассоциаты серебра, сгруппированные в островковые образования на поверхности ионообменной матрицы.

Для оценки пространственного распределения металлического компонента по зерну ионообменника изучался элементный состав серебросодержащих нанокомпозитов, который определяли методом рентгеноспектрального микроанализа (РСМА) с использованием системы AztecLive Advanced Ultim Max 40, оснащённой безазотным энергодисперсионным спектрометром. Регистрацию рентгеновских спектров проводили в ручном режиме. Микроанализ выполняли в трех характерных точках зерна. Для образцов, полученных с использованием боргидрида натрия и гидразина, выявлено неравномерное распределение металлического компонента с преимущественной концентрацией вблизи поверхности. В случае дитионита натрия неравномерность распределения также сохраняется, однако она выражена менее интенсивно.

Выявленные структурно-морфологические закономерности определяют сорбционную способность композитов по отношению к растворённому кислороду, что является ключевым фактором их эффективности в вопросах антикоррозионной защиты [1].

1 - Krysanov V., Gadebskaya M., Krysanova T. et al. // J. Compos. Sci. 2024. Т. 8. № 7. Р. 249.
<https://doi.org/10.3390/jcs8070249>

Синтез, структура и свойства тонких пленок диоксида хрома

И.Э. Грабой^{а,*}, М.Н. Маркелова^а, В.Д. Мищенко^а, Чжао Чжиюань^а, А.В. Королева^а, Н.Н. Перов^а, А.В. Назаров^а, А.Л. Васильев^б, А.Р. Кауль^а

^а ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»,
Москва, 119991 Россия

^б НИЦ «Курчатовский институт», Москва, 123182 Россия

*e-mail: graboiig@mail.ru, +74959391492

Диоксид хрома (структурный тип рутил) представляет собой полуметаллический ферромагнетик ($T_c = 393\text{K}$) со 100% спиновой поляризацией на уровне Ферми, перспективный для использования в устройствах спинтроники. Фаза CrO_2 термодинамически неустойчива в условиях получения, однако может быть стабилизирована в виде пленок за счет эпитаксии на структурно когерентных подложках. Свойства тонких эпитаксиальных пленок могут существенно изменяться из-за различного ориентирующего действия подложки или под действием упругих напряжений, вызванных рассогласованием параметров элементарных ячеек пленки и подложки, что открывает возможность целенаправленного управления магнитными и электрическими характеристиками CrO_2 .

В работе изучали влияние ориентирующего действия подложки и условий синтеза пленок диоксида хрома на их кристаллическую структуру, морфологию и физические свойства. Пленки CrO_2 синтезировали методом CVD из паров CrO_3 при атмосферном давлении в потоке кислорода. В качестве подложек использовали монокристаллические a -, c - и m - Al_2O_3 , TiO_2 (100) и TiO_2 (001), MgF_2 (100), а также MgF_2 (100) с буферным слоем TiO_2 . Пленки исследовали с помощью методов рентгеновской дифракции в различной геометрии, рентгеновской рефлектометрии, КР-спектроскопии, АСМ, МСМ, СЭМ, ПЭМВР, магнито- и резистометрии.

Эпитаксиальные пленки CrO_2 были успешно выращены на всех подложках за исключением MgF_2 . С помощью РФА и КР-спектроскопии установлено, что на подложках Al_2O_3 всех ориентаций рост пленки начинается с формирования эпитаксиального слоя Cr_2O_3 (50-80 нм), изоструктурного корунду и повторяющего ориентацию подложки, на поверхности которого эпитаксиально нарастает CrO_2 . С помощью ф-сканирования были установлены соответствующие ориентационные соотношения решеток Cr_2O_3 и CrO_2 , образующего блочную структуру, обусловленную би- и трехвариантной эпитаксией, что подтверждено данными ПЭМВР. Эпитаксия CrO_2 на изоструктурных подложках TiO_2 происходит по единственному варианту без образования промежуточного слоя Cr_2O_3 , повторяя ориентацию подложки. При осаждении буферного слоя TiO_2 на MgF_2 (100) было обнаружено межфазное взаимодействие с образованием тонкого (~30 нм) слоя MgTiO_3 (структурный тип ильменит) с ориентацией (0001) MgTiO_3 || (100) MgF_2 . Эпитаксия TiO_2 на поверхности этого слоя происходит по трем вариантам, подобно эпитаксии CrO_2 на c - Al_2O_3 . Методом ПЭМВР в подложке на границе с пленкой наблюдали образование пор Киркендалла, свидетельствующих об односторонней диффузии магния. Эпитаксиальные пленки CrO_2 , осажденные на такой буферный слой, имели блочную трехвариантную структуру, вторящую структуре и ориентации буферного слоя.

Пленки CrO_2 проявляли анизотропию магнитных свойств в разномановленном магнитном поле, что объясняется наличием оси легкого намагничивания в кристаллической структуре диоксида хрома. Показано, что доменная структура в магнитном поле определяется в первую очередь характером вариантной структуры эпитаксиальных пленок.

С. Н. Грушевская*, М. Ю. Бочарникова, А. В. Введенский

*ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия***e-mail: sg@chem.vsu.ru, +79204067144*

Модификация металлических сплавов заключается в их анодном растворении в подкисленных солевых водных растворах. Такое растворение, как правило, протекает селективно и рассматривается как надежный и универсальный метод создания нанопористых материалов, способных проявлять высокую каталитическую активность [1, 2]. Выход электроотрицательного компонента из кристаллической решетки сплава в раствор сопровождается образованием химически измененного поверхностного слоя, содержащего сверхравновесное количество точечных структурных дефектов. Рост концентрации дефектов и их эволюция способны привести к появлению системы каналов и пор в структуре сплава. Параметры этой структуры определяются режимом анодной модификации, прежде всего – потенциалом и продолжительностью.

Цель работы – определить параметры анодной модификации бинарных сплавов на основе серебра для создания пористых структур в их поверхностной зоне.

Исследования проведены методами циклической вольтамперометрии, хроноамперометрии и кулонометрии с привлечением импедансной спектроскопии, сканирующей электронной и атомно-силовой микроскопии. Объекты исследования – сплавы Ag-Zn и Ag-Pd в деаэрированном растворе 0,09 М KNO₃ + 0,01 М HNO₃. Концентрация цинка или палладия – от 5 до 30 ат.%, все сплавы представляют альфа-фазу твердых растворов замещения на основе кристаллической решетки серебра. Для каждого сплава необходимо выбрать определенное значение потенциала и продолжительности их анодной модификации. Появление пор контролировалось на качественном уровне по микрофотографиям. Количественной характеристикой степени модификации служил относительный фактор шероховатости поверхности f_t .

Обнаружено, что после анодной модификации сплавов системы Ag-Zn f_t близок к единице (таблица), что указывает на отсутствие значительной эволюции поверхности. Лишь на сплаве с максимальной концентрацией цинка (30 ат.%) при любой длительности модификации при всех изученных потенциалах шероховатость увеличивается в 1,5-3 раза. Таким образом, с увеличением концентрации цинка изменения в морфологии поверхности сплавов, вызванные анодной модификацией, становятся все более значимыми.

На сплавах системы Ag-Pd величина f_t в целом выше и растет примерно от 4 до 17 по мере уменьшения концентрации палладия от 30 до 5 ат.%.

Таблица. Относительный фактор шероховатости f_t поверхности сплавов, подвергнутых анодной модификации в течение 60 с (числитель) при различных потенциалах E , В (ст.в.э.) (знаменатель)

X_{Zn} / X_{Pd} , ат.%	5	10	15	20	30
Ag-Zn	1,0 / 0,42	1,0 / 0,41	1,7 / 0,40	1,0 / 0,40	2,8 / 0,40
Ag-Pd	17 / 0,65	8,9 / 0,70	5,1 / 0,75	4,1 / 0,80	4,4 / 0,85

1. Chuang A., Erlebacher J. // Materials. 2020. V. 13. 3706. doi: 10.3390/ma13173706

2. Cai C., Guo S., Li B., [et al.] // ACS Applied Materials & Interfaces. 2021. V. 13. P. 48709-48719. doi: 10.1021/acsami.1c14076

Алгоритм поиска моноклинных кристаллов, способных претерпевать структурные фазовые переходы второго рода с перестройкой в ромбическую фазу

Дрожилкин П.Д., Сомов Н.В.

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
pddrozhilkin@yandex.ru, +7 (831) 462-33-03

При фазовом переходе второго рода группы симметрии высокосимметричной и низкосимметричной фаз, как правило, соотносятся как группа-подгруппа [1]. При известной симметрии низкосимметричной фазы, возможные группы симметрии высокосимметричной фазы можно определить при помощи дескрипторов, описывающих псевдосимметрию кристалла [2].

Псевдосимметрию кристалла можно описать с помощью степени инвариантности электронной плотности

$$\eta_g[\rho(r\vec{r})] = \frac{1}{V} \int_V \rho(r\vec{r}) \rho(g\vec{r}) dV, \quad (1)$$

где $\rho(r\vec{r})$ – функция электронной плотности кристалла, g – оператор изометрического преобразования (оператор симметрии кристалла), V – объем элементарной ячейки. K – нормировочный коэффициент [3]. Для поиска моноклинных кристаллов, базис которых может быть преобразован в псевдоромбический удобно использовать дескриптор, характеризующий решетку моноклинного кристалла в минералогической установке

$$Q_\beta(m, n, p, q) = \frac{qra^2 + nmc^2 - (mq + np)ac \cos \beta}{\sqrt{(qa - nc)^2 + 2qnac(1 - \cos \beta)} \sqrt{(pa - mc)^2 + 2ptac(1 - \cos \beta)}}, \quad (2)$$

где a, c, β – параметры ячейки, а m, n, p, q – некоторые подбираемые целые числа. В кристаллографической установке достаточно заменить c на b , а угол β на γ .

Если найдутся целые числа m, n, p, q , что $Q_\beta \in [0.000, 0.079]$, то можно построить ромбический базис, формирующий надгруппу для моноклинного. Векторы $\vec{u}$ и $\vec{v}$ нового ромбического базиса, лежащие в плоскости моноклинности

$$\begin{cases} \vec{u} = \frac{q}{mq - np} \vec{a} - \frac{n}{mq - np} \vec{c} \\ \vec{v} = \frac{-p}{mq - np} \vec{a} + \frac{m}{mq - np} \vec{c} \end{cases}, m, n, p, q \in \mathbb{Z}. \quad (3)$$

Если η относительно найденных трансляций (3), параллельных им осей второго порядка и перпендикулярных плоскостей отражения, превышает некоторое значение, то исследуемый моноклинный кристалл может претерпевать структурный фазовый переход второго рода. Группа симметрии ромбической фазы может быть получена добавлением найденных операторов псевдосимметрии к исходной моноклинной группе.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках базовой части государственного задания. Проект FSWR-2026-0004.

- [1] Ландау Л. Д. // ЖЭТФ. 1937. Т. 19, № 7.
- [2] Thompson S., et. al. // CrystEngComm. 2025. V. 27. P. 5803;
- [3] Чупрунов Е. В., и др. // Кристаллография. 1988. Т. 33, № 3. С. 759.

**Тонкие пленки сложных оксидов, как функциональные слои
в твердооксидных топливных элементах**

В. А. Дыбов^{а,*}, В. А. Еремин^а, А. Р. Ахмадеев^а, Ф. Ю. Бочканов^а, Е. А. Богданова^а, А. А. Маркин^а, С. А. Стрелков^{а,б}, Г. С. Сафронов^{а,б}, Д. С. Боровитин^а, А. А. Михайлова^{а,в}, К. А. Щербакова^{а,в}, А. Б. Стариков^а, А. Я. Акыева^а, И. Д. Пономарев^а

^а АО «Гиредмет», Москва, 111524 Россия

^б РХТУ им. Менделеева, Москва, 125047 Россия

^в ФГАОУ ВО «НИТУ МИСИС», Москва, 119049 Россия

*e-mail: dybovvlad@gmail.com, +79518591327

В АО «Гиредмет» с 2022 года ведется разработка полностью отечественной технологии создания энергетических установок на основе среднетемпературных твердооксидных топливных элементов (СТ-ТОТЭ) в рамках приоритетного направления научно-технологического развития «Водородная энергетика» Госкорпорации «Росатом».

Разработка СТ-ТОТЭ требует создания функциональных тонкопленочных слоев, обеспечивающих высокую электрохимическую активность и стабильность характеристик при температурах 600 – 700 °С. Одними из перспективных материалов для формирования буферных и электролитных функциональных слоев в таких элементах являются оксиды церия (CeO_2) и галлата лантана (LaGaO_3), легированные различными редкоземельными элементами.

В настоящей работе рассмотрены особенности формирования тонких пленок оксида церия и галлата лантана методом высокочастотного магнетронного распыления. Использование физического осаждения из газовой фазы позволяет получать равномерные тонкие и плотные покрытия с контролируемой толщиной и морфологией, а также обеспечивает совместимость процесса с существующими шликерными технологиями изготовления элементов ТОТЭ (трафаретная печать, центрифугирование).

Исследовано влияние основных параметров процесса осаждения, включая мощность разряда, давление рабочей газовой смеси и содержание кислорода, на структуру и сплошность формируемых пленок. Установлено, что оптимизация режимов распыления позволяет получать плотные однофазные покрытия без выраженных дефектов поверхности. Полученные пленки характеризуются высокой адгезией к керамическим подложкам и сохраняют структурную целостность после термической обработки в диапазоне рабочих температур СТ-ТОТЭ.

Результаты работы подтверждают перспективность использования тонких пленок оксида церия и оксида галлата лантана в качестве функциональных слоев твердооксидных топливных элементов. Применение подобных покрытий может способствовать повышению долговременной стабильности и плотности мощности, снимаемой с единичного топливного элемента.

Работы выполняются в рамках реализации проекта НИОКР № 054-005-549 (номер в информационной системе «Сириус») и субсидии Минпромторга РФ по ПП № 1649. Исследования проводились с использованием оборудования ЦКП-ИАСЦ АО «Гиредмет».

**Электронная микроскопия пленок, полученных методом
атомно-слоевого осаждения**

О.М. Жигалина^{а,*}, Д.Н. Хмеленин^а, В.Г. Басу^а, В.А. Якушев^б,
А.С. Вишневский^б, К.А. Воротилов^б

^а Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт», Москва, 119333, Россия

^б МИРЭА – Российский технологический университет (РТУ МИРЭА), Москва, 119454, Россия

e-mail: zhigal@ns.crys.ras.ru, +74991350010

Благодаря своим регулируемым электрическим, магнитным и каталитическим свойствам тонкие никелевые пленки являются перспективным материалом для различных применений, включая передовую микроэлектронику, технологии сбора энергии, датчики, спинтронику и т. д. Переход к 3D-архитектуре и непрерывное уменьшение критических размеров в микро- и нанoeлектронике требуют конформного осаждения металлических слоев внутри структур с высоким соотношением сторон. Атомно-слоевое осаждение (ALD) пленок используется в микроэлектронике для создания различных слоев и контактов, катализаторов и компонентов батарей, где непрерывность пленки, размер зерен и химическая чистота имеют решающее значение [1].

Исследования структуры плёнок проводили методами растровой электронной микроскопии (РЭМ), просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ). Показано, что ALD-осаждение Ni из паров прекурсора приводит к образованию нанокристаллического слоя толщиной 60 нм со средним размером кристаллитов ~9 нм. Отжиг на воздухе приводит к превращению Ni в кубический NiO, сопровождающемуся укрупнением зерен до ~40 нм и развитием выраженной пористости. Вакуумный отжиг сохраняет металлический Ni, но вызывает потерю целостности пленки и агрегацию в изолированные сферические кристаллиты со средним диаметром ~186 нм. Кристаллиты, образовавшиеся после вакуумного отжига, демонстрируют гексагональную плотноупакованную (ГПУ) решётку, нетипичную для никеля, и обладают структурой ядро Ni/оболочка NiO (<5 нм). Эти результаты показывают, что атмосфера отжига и температурный профиль действуют как переключатель, определяющий пути эволюции никеля, выращенного методом ALD.

Исследована структура новых композитных пленок PZT/TiO_x. Пористые пленки PZT получали методом самосборки, индуцированной испарением, с использованием поверхностно-активного вещества Brij 76. В результате образовалась перовскитная столбчатая пленка PZT с пористой структурой (радиус пор 8,7–13,5 нм). Затем диоксид титана был осажден в поры методом ALD. Как показано с помощью ПЭМ, пленка диоксида титана равномерно растет внутри пор, как на верхней поверхности пленки, так и на нижней границе с платиновым электродом.

Было показано, что композитные пленки PZT/TiO_x демонстрируют стационарный фотоэлектрический ток, связанный с фазой TiO_x.

Работа выполнена по Госзаданию НИЦ КИ в части электронной микроскопии. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (РНФ), грант № 23-79-30016.

1. Seregin D. S. et al. Photocurrent in PZT/TiO_x composite film prepared via self-assembly of perovskite matrix and ALD of titania //Materials Chemistry and Physics. – 2025. – Vol. 332. – P. 130224.

Компьютерное моделирование стабилизации фуллерена C₂₆ инкапсулированием атомов 3d-переходных металлов

Зайцев Д.О., Борщ Н.А.

Воронежский государственный университет
borsch@phys.vsu.ru

Изучение факторов стабилизации малых фуллеренов (таких как C₂₆) представляет фундаментальный интерес, поскольку в чистом виде эти фуллерены крайне нестабильны. В настоящей работе с помощью квантовохимического моделирования исследуется концепция формирования замкнутой сферической оболочки из 108 валентных электронов как электронного критерия стабилизации эндоэдральных кластеров C₂₆Me (Me = Sc, Ti, V). Для проверки правила 108 электронов металлофуллерены моделировались в моноанионном зарядовом состоянии для Sc-инкапсулированного фуллерена, нейтральном для Ti-инкапсулированного кластера и монокатионном состоянии в случае инкапсуляции атома V.

Моделирование пространственной структуры металлофуллеренов выполнено в программном пакете Gaussian 09 [1]. Расчеты электронной структуры и оптимизация геометрии осуществлялись в рамках теории функционала плотности (DFT) с использованием гибридного функционала B3PW91 и псевдопотенциала LanL2DZ.

Инкапсулированный атом металла занимает асимметричное положение внутри фуллерена, смещаясь относительно центра кластера. Величина этого смещения возрастает с ростом порядкового номера атома металла, что обуславливает сокращение длины химической связи металл-углерод с одной из внутренних стенок фуллерена.

Таблица 1. Основные параметры пространственной и электронной структуры металлофуллеренов

Кластер	Длина связи C-C, Å	Длина связи C-Me, Å	Средняя энергия связи, эВ/атом	Запрещенная щель, эВ
C ₂₆	1.388-1.539	–	6.110	1.552
C ₂₆ Sc [–]	1.449-1.560	2.193-2.308	6.243	2.852
C ₂₆ Ti	1.443-1.545	2.052-2.123	6.134	3.014
C ₂₆ V ⁺	1.435-1.547	1.985-2.085	5.799	3.103

Энергия связи в металлофуллеренах падает от Sc-инкапсулированного к V-инкапсулированному кластеру, так, что кластеру C₂₆Sc[–] соответствует наибольшая средняя энергия связи. Главным индикатором электронной стабильности полученных металлофуллеренов является резкое увеличение ширины запрещенной щели. Данный факт служит доказательством формирования устойчивой электронной оболочки из 108 валентных электронов.

Компьютерное моделирование подтвердило гипотезу стабильности металлофуллеренов с замкнутой 108-электронной оболочкой. Обнаруженные закономерности изменения электронных свойств могут быть использованы при конструировании новых функциональных материалов с легко варьируемыми характеристиками.

[1] Gaussian 09, Revision D.01, M. J. Frisch et al., Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2013.

Влияние органических добавок разного типа на кинетику электрокристаллизации меди и морфологию электроосажденных медных покрытий

Е. А. Ильина*, О. А. Козадеров, Н. В. Соцкая

ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия

*e-mail: Zhenya.Ali@yandex.ru, +79042885663

Для регулирования физико-химических и морфологических свойств гальванических медных покрытий в электролиты меднения вводят органические добавки, которые выполняют различные специфические функции в процессе осаждения (подавление, ускорение, выравнивание). В настоящей работе устанавливаются кинетические закономерности электроокристаллизации меди при катодном осаждении из кислого сульфатного электролита в присутствии органических добавок разного типа, а также их влияние на морфологию электроосажденных медных покрытий.

В качестве добавок использовали динатриевую соль 3,3'-дитиодипропандисульфокислоты (СПС), полиэтиленгликоль с молярной массой 4000 г/моль (ПЭГ) и N-метилполивинилпиридин-метилсульфат с молярной массой 300000 г/моль (МПВП-МС).

По данным сканирующей электронной микроскопии поверхность Cu-покрытия, полученного из электролита без добавок, характеризуется крупнозернистой структурой с размытием межзеренных границ. В присутствии дисульфидной добавки СПС формируются кристаллиты меньшего размера и с более четкими гранями. Введение полиэтиленгликоля приводит к формированию глобулярной, а катионного гетероциклического полимера с кватернизированным азотом МПВП-МС – слоистой структуры покрытия. При совместном присутствии добавок СПС и ПЭГ в электролите осаждения наблюдается существенное сглаживание поверхности медного покрытия. Аналогичное влияние на морфологию покрытия оказывает комплекс добавок СПС, ПЭГ и МПВП-МС.

Нестационарными электрохимическими методами вольтамперо-, хронопотенцио- и хроноамперометрии установлено, что полимерные добавки ПЭГ и МПВП-МС оказывают заметное ингибирующее действие на процесс электрохимического осаждения меди, в то время как добавка СПС – ускоряющее. Выявлено, что процесс электрокристаллизации меди является диффузионно-контролируемым независимо от наличия добавок в растворе. Анализ значений кинетических параметров нуклеации показывает, что при введении изучаемых добавок и их композиций плотность центров зародышеобразования снижается по сравнению с раствором без добавок, за исключением электролита, содержащего ПЭГ. Процесс активации центров зародышеобразования в растворе без добавок, в присутствии МПВП-МС, СПС, а также композиции СПС + ПЭГ + МПВП-МС является мгновенным. Введение ПЭГ и композиции СПС + ПЭГ в сульфатный электролит меднения увеличивает вероятность перехода от мгновенной активации центров зародышеобразования к непрерывной.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2025-2027 годы, проект № FZGU-2025-0001.

Исследование объёмных кристаллов оксида галлия методами резонансной акустической спектроскопии

Калганов Д. А., Панов Д. Ю., Спиридонов В. А., Бауман Д. А., Романов А. Е.

Университет ИТМО
kalganov@itmo.ru, тел: +79043093268

Объёмные кристаллы бета-фазы оксида галлия $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ являются перспективным материалом для силовой электроники благодаря широкой запрещённой зоне и высокому (расчётному) напряжению электрического пробоя. Для проектирования полупроводниковых приборов на их основе критически важно знание упругих свойств, влияющих на поля механических напряжений и взаимодействие дефектов. Определение всех 13 независимых компонент C_{ij} тензора упругости моноклинного кристалла $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ представляет собой сложную задачу для методов моделирования и для уточнения их величин по экспериментально получаемым характеристикам данного материала.

В настоящей работе выполнено определение упругих постоянных $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ комбинацией расчётов из первых принципов и последующего уточнения по данным акустической спектроскопии – высокочастотной спектроскопии резонансных колебаний и одномодового метода составного пьезоэлектрического осциллятора (СПО). Расчёты референсных значений C_{ij} проведены в рамках теории функционала плотности с использованием пакета Quantum ESPRESSO [1]. Использованы ультрамягкие псевдопотенциалы из библиотеки PSlibrary [2]. Упругие постоянные определены методом расчёта энергии деформированных структур в системе малых одноосных, сдвиговых и комбинированных деформаций. Уточнение этих значений выполнено с помощью программы RUScal [5]. Получены физически корректные [3,4] значения C_{ij} (ГПа): $C_{11}=250.4$, $C_{12}=133.2$, $C_{13}=144.3$, $C_{15}=-18.6$, $C_{22}=358.1$, $C_{23}=82.1$, $C_{25}=16.3$, $C_{33}=363.0$, $C_{35}=4.4$, $C_{44}=54.9$, $C_{46}=17.2$, $C_{55}=69.1$, $C_{66}=99.8$.

Также в работе исследованы характеристики дефектной структуры кристаллов. Порог микропластической деформации, определённой по нелинейной зависимости внутреннего трения методом СПО (4×10^{-5} отн.) определяет соотношение плотностей всех и подвижных дислокаций. Плотность дислокаций для направления $[010]$ кристаллов $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$, определённая по данным высокоразрешающей рентгеновской дифракции, составляет 10^6 см^{-2} . Полученные данные могут быть использованы для оценки структурного совершенства объёмных кристаллов $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ и моделирования напряжённо-деформированного состояния функциональных элементов из них.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 24-12-00229).

1. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials // Journal of physics: Condensed matter. 2009. Vol. 21. No. 39. art. no. 395502.
2. Dal Corso A. Elastic constants of beryllium: a first-principles investigation // Journal of Physics: Condensed Matter. 2016. Vol. 28. No. 7. art. no. 075401.
3. Adachi K., Ogi H., Takeuchi N., et al. Unusual elasticity of monoclinic $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ // Journal of Applied Physics. 2018. Vol. 124. No. 8. art. no. 085102.
4. Ponce S., Giustino F. Structural, electronic, elastic, power, and transport properties of $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ from first principles // Physical Review Research. 2020. Vol. 2. No. 3. art. no. 033102.
5. Torres J., Flores-Betancourt A., Hermann R.P. RUScal: Software for the analysis of resonant ultrasound spectroscopy measurements // The Journal of the Acoustical Society of America. 2022. Vol. 151. No. 5. pp. 3547-3563.

**DiffSolver – программа для автоматизированной расшифровки
дифракционных картин**

И. А. Каратеев*

НИЦ «Курчатовский институт», Москва, 123182 Россия

*e-mail: Karateev_IA@nrcki.ru, +79152297822

Одной из важнейших задач просвечивающей электронной микроскопии остается изучение кристаллической структуры вещества. Обычно для этого используют дифракцию или Фурье-анализ от изображения с высоким разрешением. Расшифровка дифракционных картин хотя и является стандартной задачей для специалиста по электронной микроскопии, но может потребовать существенного времени, особенно при необходимости проверить несколько фаз-кандидатов.

Программное обеспечение (ПО) DiffSolver призвано ускорить и упростить процесс расшифровки дифракционных картин. Данное ПО опирается на результаты разработки программного комплекса дифракционного картирования [1], но, в отличие от него, сосредоточено на расшифровке отдельных дифракционных картин.

Для работы с ПО пользователю необходимо подготовить дифракционную картину или Фурье-изображение в одном из поддерживаемых форматов: dm3, ser, bmp, jpg, tiff. Также для расшифровки необходимы файлы с кристаллографической информацией – cif или xml.

На первом этапе происходит обнаружение дифракционных пиков на изображении, это может происходить как в автоматическом, так и в ручном режиме. Далее программа идет по списку файлов с кристаллографическими фазами, для каждой из них находит оптимальную ориентацию и вычисляет значение параметра *fit*, который показывает, насколько хорошо экспериментальная дифракция совпадает с расчетной, определенной программой. В качестве решения программа выбирает фазу с наибольшим значением параметра *fit*. На рисунке 1 приведен пример расшифровки дифракционной картины, полученной от кристаллита Nb₆Sn₅. Из всех фаз, содержащих Nb и Sn, программа выбрала Nb₆Sn₅ и показала, что дифракция соответствует оси зоны **B**=[112].

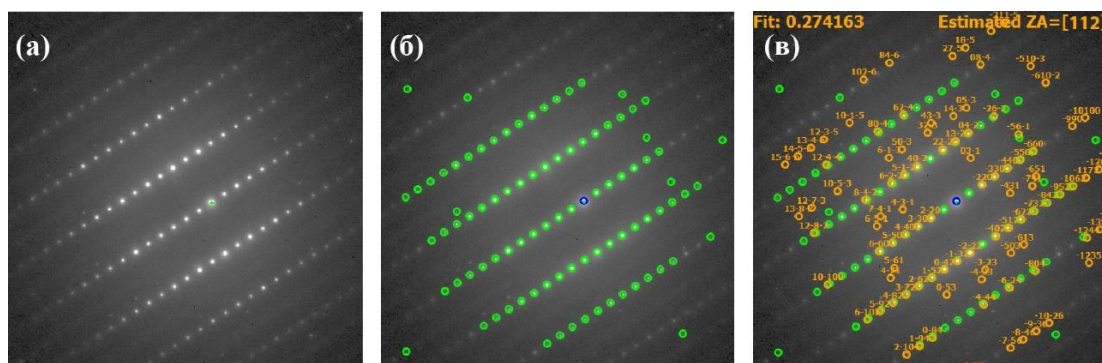


Иллюстрация процесса расшифровки дифракционной картины: (а) исходная дифракционная картина, (б) результат детектирования пиков, (в) расшифрованная дифракционная картина

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. И.А. Каратеев, А. В. Овчаров, К.Г. Каратеева и др. Кристаллография, 2023, 68, 143-152.

«Химия, физика и механика материалов» как междисциплинарное направление подготовки студентов – опыт факультета наук о материалах МГУ

А. В. Кнотько*, В. И. Путляев, Е. А. Гудилин, А. В. Лукашин

ФГБОУ ВО Московский государственный университет, Москва, 119991 Россия

*e-mail: knotkoav@my.msu.ru, +74959394259

Появлению в российской системе высшего образования направления подготовки «Химия, физика и механика материалов» предшествовало создание по инициативе и под руководством академика Ю.Д. Третьякова в составе МГУ имени М.В.Ломоносова Высшего колледжа (сейчас - факультет) наук о материалах (ВКНМ) в 1991 г., что было продиктовано потребностями стремительно развивающейся науки и техники на рубеже XXI века, особенно в областях, находящихся на "стыке" различных наук, таких как химия твердого тела, физика полупроводниковых, магнитных и оптических материалов, механика композитных конструкционных материалов, включая такие современные направления как нанотехнологии и наноматериалы, биоматериалы, фотоника, сенсорики, микроэлектроника, спинтроника, ионика твердого тела.. На основе образовательной программы ВКНМ в 1999 г. приказом министерства образования РФ было утверждено направление подготовки «Химия, физика и механика материалов», основной задачей которого является подготовка материаловедов-исследователей высокого уровня, способных проводить современные научные исследования в различных областях материаловедения. Возможность эффективной работы выпускников по данному направлению требует междисциплинарной фундаментальной подготовки.

Такая фундаментальная материаловедческая подготовка, предусматриваемая направлением «Химия, физика и механика материалов», включает в себя изучение химии, физики (с особым вниманием к физике твердого тела), механики и математики как инструмента, необходимого во всех современных естественных науках. Главная особенность системы подготовки студентов по данному направлению – режим максимального благоприятствования для занятий научной работой. Студенты вовлекаются в реальную научную работу подразделений МГУ или институтов РАН уже с первого семестра обучения. Важным аспектом научной работы студентов при этом являются ежегодные научные конференции, дающие студенту опыт представления и защиты результатов своей научной работы.

В магистратуре при этом студенты слушают несколько обязательных для них фундаментальных материаловедческих курсов, но главное – большое количество спецкурсов по выбору, рассматривающих различные аспекты химии и физики современных материалов. Также при обучении в магистратуре большое внимание уделяется современным методам диагностики материалов с использованием сложного современного научного оборудования. Кроме того, для расширения своего научного кругозора и получения новых исследовательских навыков студенты магистратуры проходят длительную (12 недель) научно-исследовательскую практику вне факультетов и институтов МГУ.

Кроме факультета наук о материалах МГУ в Москве, направление подготовки «Химия, физика и механика материалов» реализуется Московским университетом с 2011 года в филиале МГУ в г. Душанбе (бакалавриат), а с 2017 г. – совместном университете МГУ-ППИ в г. Шэньчжэнь, КНР (бакалавриат и магистратура), причем с сохранением принципиально важного для направления вовлечения студентов в реальную научную работу.

Селективное растворение сплавов как метод управления рельефом поверхности и электрокаталитической активностью электродного материала

О. А. Козадеров, Ф. А. Вдовенков, Е. В. Бедова

ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия

**e-mail: ok@chem.vsu.ru, +74732208546*

Селективное растворение (СР) гомогенных сплавных систем, реализуемое при закритической анодной поляризации, сопровождается не только изменением химического состава поверхностного слоя в результате избирательного вытравливания электроотрицательного компонента, но и существенным морфологическим развитием поверхности, а также необратимыми фазовыми превращениями с участием электроположительного компонента. Совокупность данных процессов наряду с условиями и продолжительностью протекания СР определяют уровень электрокаталитической активности анодно-модифицированных сплавов, которые являются перспективными электродными материалами для электрохимических источников электрического тока, сенсоров и т.п. При этом алгоритм корректного учета эффекта морфологического развития поверхности электрода, предполагающий нормировку скорости на площадь электрохимически активной поверхности, зависит от кинетики электродного процесса (электрохимическая, диффузионная, смешанная). В настоящей работе обобщаются результаты исследований по установлению взаимосвязи между морфологическими изменениями поверхностного слоя бинарных сплавов, подвергнутых закритическому селективному растворению, с одной стороны, и электрокаталитической активностью синтезируемых электродных материалов, с другой. Выявлена роль изменений шероховатости поверхности при селективном растворении палладиевых сплавов в увеличении их электрокаталитической активности в реакции электроокисления муравьиной кислоты. При этом впервые учтена смешанная кинетика данного процесса с использованием разработанной теоретической модели, в рамках которой для случая сопоставимых скоростей электрохимической и диффузионной стадий получены потенциостатические хроноамперограммы для электродов с различным гармоническим, фрактальным и статистически нерегулярным рельефом. С применением результатов численного моделирования обоснована процедура корректной оценки скорости кинетической стадии анодного окисления муравьиной кислоты на поверхности палладиевых сплавов с учетом их морфологического развития. При этом показано, что скорость электроокисления НСООН оказывается выше на более шероховатых электродах и зависит от условий селективного растворения (анодный потенциал, пропущенный заряд). Таким образом, СР сплава позволяет управлять как морфологическим состоянием, так и электрокаталитической активностью электродного материала для анодного окисления муравьиной кислоты. Наиболее вероятной причиной выявленной активизации поверхности сплава в ходе его селективного растворения является формирование энергонасыщенной и морфологически развитой фазы палладия, протекающее при закритических условиях поляризации по механизму мгновенной активации центров гетерогенного зародышеобразования.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2025-2027 годы, проект № FZGU-2026-0009.

Влияние геометрии модельных рисунков 3d-печати на микроструктуру и гидрофильные свойства образцов из полимеров PLA, PETG и ABS

А.С. Леньшин ^{а,*}, В.Е. Фролова ^а, Э.П. Домашевская ^а

^а ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Университетская пл.1,
394018 Воронеж, Россия

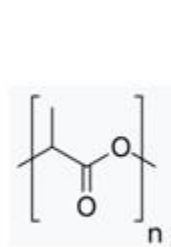
*e-mail: lenshinas@mail.ru, +89204073394

Результаты исследования образцов, напечатанных из аморфных нитей трех полимеров: полилактид PLA, полиэтилен-терефталат-гликоль PETG и акрилонитрил-бутадиен-стирол ABS. методом последовательного наложения слоев FDM (Fused Deposition Modeling) на 3D-принтере Hercules Original с модельными рисунками: 1_Hilbert, 2_Concentric, 3_Archimedian, 4_Rectilinear, 5_Octagram, показали различную степень влияния геометрии модельного рисунка 3D- печати на микроструктурные и гидрофильные свойства образцов из трех разных полимеров, исследованные методами сканирующей электронной микроскопии, рентгенофазового анализа, ИК-спектроскопии и измерений краевого угла смачивания.

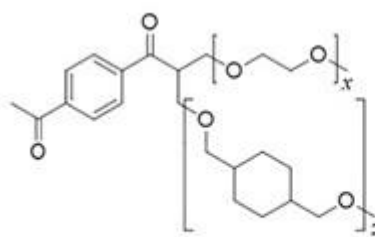
Сравнительный анализ формы и относительной интенсивности отражений на дифрактограммах образцов из трех полимеров обнаружил наибольшую устойчивость исходного аморфного состояния сополимера ABS по сравнению с двумя другими полимерами, к тепловым и механическим воздействиям процесса 3D-печати во всех напечатанных образцах.

При этом образцы из ABS проявляют наименьшую гидрофильность и показывают большую зависимость средней величины краевого угла смачивания поверхности образцов от геометрии модельного рисунка, в то время как образцы из полимера PETG являются наиболее гидрофильными, имеют близкие значения краевых углов смачивания поверхности с разными модельными рисунками, и не показывают заметного влияния их геометрии на смачиваемость поверхности образцов.

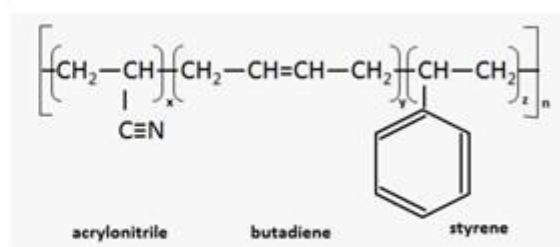
В образцах из PLA с различными модельными рисунками обнаружена разная степень частичной кристаллизации первоначально разориентированных полимерных цепей аморфной нити с возникновением орторомбической фазы α -Poly(L-lactide).



a) PLA



b) PETG



c) ABS

Структурные формулы полимеров: а) полилактид PLA, б) полиэтилен-терефталат-гликоль PETG и с) акрилонитрил-бутадиен-стирол ABS.

М.Н. Маркелова^{а,*}, И.Э. Грабой^а, А.А. Хафизов^а, А.О. Озеренская^а, В.Д. Мищенко^а
А.К. Кадикова^б, Р.В. Юсупов^б, А.Р. Сафин^в, А.Р. Кауль^а

^а ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»,
Москва, 119991 Россия

^б ФГБОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Казань, 420008
Россия

^в ФГБУН Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова Российской
академии наук, Москва, 125009, Россия

*e-mail: pomar-ka@yandex.ru, +74959391492

Современные радиотехника и телекоммуникационные технологии (6G) требуют создания устройств, способных работать в терагерцовом (ТГц) диапазоне при минимальном энергопотреблении. Решением являются технологии спинтроники – стремительно развивающейся области электроники, в которой ключевую роль играет не заряд, а спин электрона. Для применения в спинтронике ведутся работы по получению, исследованию структуры и свойств тонких пленок антиферромагнетиков [1], одним из которых является гематит (α -Fe₂O₃) со структурой корунда, являющийся антиферромагнетиком ниже температуры Морина ($T_M = 260$ К) и скошенным антиферромагнетиком (слабым ферромагнетиком) выше T_M , что дает возможность возбуждения колебаний в области частот от десятков ГГц до единиц ТГц.

Целью данной работы является синтез, изучение структуры и функциональных свойств эпитаксиальных пленок α -Fe₂O₃ на монокристаллических подложках a -, c -, m - и r -Al₂O₃, в том числе с изоморфными буферными слоями Cr₂O₃ и Rh₂O₃, а также эпитаксиальных гетероструктур (Fe₂O₃/Cr₂O₃)_{*n*} ($n = 1 \div 6$). Для эпитаксиального роста пленок и гетероструктур использовали химическое осаждение из паров дипивалоилметанатов (МОСVD) с нитепротяжным питателем [2]. Пленки исследовали методами рентгеновской дифракции в различных геометриях, рентгеновской рефлектометрии, атомно-силовой и растровой электронной микроскопии, вторично-ионной масс-спектрометрии, ПЭМВР поперечного среза, магнитометрии и время-разрешенной магнитооптической спектроскопии.

Эпитаксиальные пленки α -Fe₂O₃ были выращены на всех подложках. Показано, что эпитаксиальный рост гематита усложняется образованием примесных полиморфов ε - и γ -Fe₂O₃, что приводит к появлению в магнитных петлях гистерезиса высококоэрцитивной компоненты. Также установлено, что на подложках Al₂O₃ всех ориентаций рост пленки гематита сопровождается диффузией алюминия в толщу растущего слоя с образованием твердого раствора Fe_{2-x}Al_xO₃ ($x \approx 0.02$). Эксперименты по накачке-зондированию в диапазоне температур 140-300 К подтвердили наличие перехода Морина. Уменьшение толщины пленок понижает T_M , что связано с увеличением вклада напряженного состояния пленок. Использование буферных слоев позволяет снизить упругие напряжения на интерфейсе пленка/подложка и подавить диффузию алюминия.

1. Baltz V. // Rev. Mod. Phys. 2018. V. 90, P. 015005. doi: 10.1103/RevModPhys.90.015005.

2. Маркелова М.Н. и др. // Конденсированные среды и межфазные границы. 2024. Т. 1, № 27. С. 104-114. doi: 10.17308/kcmf.2025.27/12488

Квантово-химическое моделирование газофазной адсорбции глицина на поверхности никеля

И.В. Нечаев

Воронежский государственный университет

E-mail: nechaev_iv@chem.vsu.ru

Детализация микроскопической картины взаимодействия аминокислот с поверхностью металлов является важным аспектом для развития физико-химической теории адсорбционных процессов. Эти данные необходимы, к примеру, для выявления роли глицина в кинетике катодного соосаждения и электрокристаллизации цинка и никеля.

В работе проведены квантово-химические расчёты адсорбции глицина как на монокристаллическом никеле, так и на кристалле, содержащем дефекты разнообразного генезиса. Расчёты выполнены с использованием программного пакета GPAW [1], с использованием неэмпирического функционала vdW-DF2 [2].

Установлено наличие трёх адсорбционных положений глицина на поверхности Ni(111), наиболее устойчивое из которых приведено на рис. 1. Наличие дефектов поверхности, таких как вакансии, тривакансия, и адсорбированный атом усиливают взаимодействие глицина с поверхностью Ni(111). Наибольший эффект наблюдается при адсорбции на адатоме. Хемосорбция глицина сопровождается незначительным переносом заряда, направление которого определяется адсорбционным положением.

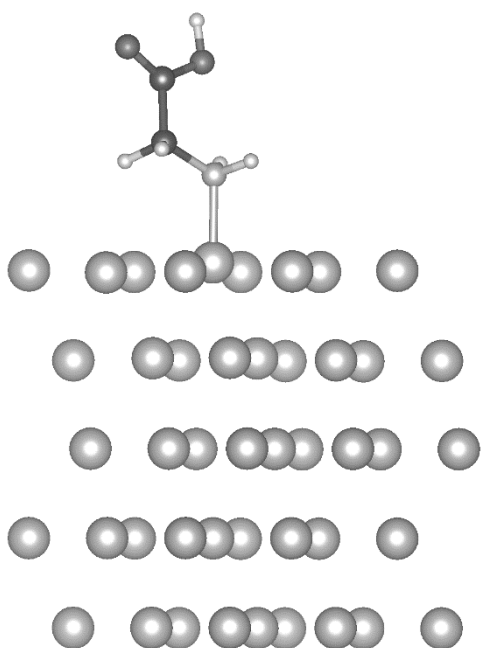


Рисунок 1. Наиболее устойчивое адсорбционное положение глицина

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jørgen J. [et al.] GPAW: An open Python package for electronic structure calculations featured / J. Chem. Phys. 2024. V. 160. –P. 092503(1-41).
2. Lee K. [et al.] Higher-accuracy van der Waals density functional / Phys. Rev. B. 2010. V. 82. P. 081101(1-4).

Квантово-размерный эффект в люминесценции полупроводниковых коллоидных квантовых точек имеет принципиальное значение при создании устройств фотоники, таких как электролюминесцентные и лазерные излучатели; люминесцентные сенсоры; люминесцентные индикаторы температуры, показателя pH; амплитудные и фазовые модуляторы системы; высококонтрастные системы люминесцентного мониторинга биообъектов *in vivo*, *in vitro* и т.п.

В работе рассматриваются процессы фотостимулированного управления характеристиками люминесценции (механизм люминесценции, положение максимума, полуширина полосы, квантовый выход) полупроводниковых коллоидных квантовых точек сульфидов и селенидов ряда металлов (на примере CdS, $Zn_xCd_{1-x}S$, CdTe, Ag₂S, Ag₂Se, PbS).

Рассматривается отдельная проблема фотостимулированного управления люминесценцией полупроводниковых коллоидных квантовых точек различных составов – однозначное установление механизма люминесценции, а также выяснение взаимосвязи её возникновения со степенью нестехиометрии соединений, из которых они приготовлены, структурой интерфейсов, присутствием диэлектрических и полимерных оболочек, особенностями их функционализации, в том числе органическими молекулами красителей, плазмонными наночастицами.

Продемонстрированы возможности управления параметрами люминесценции коллоидных квантовых точек CdS, $Zn_xCd_{1-x}S$ в условиях фототравления. Показана роль в соответствующих фотохимических процессах активных форм кислорода.

Обсуждаются эффекты фотоактивации и фотодеградации люминесценции коллоидных растворов квантовых точек CdTe и полимерных композитов на их основе. Установлена возможность управления положением спектров люминесценции (от 485 нм до 540 нм) и квантового выхода (QY) (от 0.15% до 35%) люминесценции при постпрепаративной лазерной обработке. Обнаружено, что введение в коллоидный раствор квантовых точек CdTe/3МРА акцептора дырок (сульфит натрия) позволяет увеличить QY до 65% не за счёт ускорения разгорания люминесценции, а за счёт выключения процесса захвата ловушками неравновесных дырок оборванными связями теллура и безызлучательных процессов с участием ненасыщенных атомов теллура.

Рассматривается также фотодеградация экситонной и рекомбинационной люминесценции гидрофильных коллоидных квантовых точек Ag₂Se и Ag₂S, пассивированных тиокарбоновыми кислотами. Обнаружена обратимость фотодеградации люминесценции квантовых точек Ag₂Se и Ag₂S. При выдерживании экспонированного коллоидного раствора КТ Ag₂Se происходит длинноволновый сдвиг полосы рекомбинационной люминесценции в область 960-1200 нм при еще большем уменьшении времени ее затухания до 170 нс. Полученные закономерности объяснены формированием core/shell-систем Ag₂Se/SeO₂ с гетеропереходом I типа. В случае коллоидных квантовых точек Ag₂S основным механизмом фотостимулированной деградации их люминесценции оказывается фотодесорбция пассиватора фотолиз нанокристаллов.

А. О. Петрова^{а,*}, А. У. Гайсин^а, А. В. Бугаев^а,
В. А. Матвеев^а, С. С. Сахonenков^а, Е. О. Филатова^а

^а *Санкт-Петербургский государственный университет, Россия, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб. 7/9*

*e-mail: a.o.petrova@spbu.ru, +79215249652

Многослойные структуры на основе магнитных материалов Fe и Co представляют значительный интерес благодаря сочетанию высокой намагниченности насыщения, низкой коэрцитивной силы и возможности управления магнитной анизотропией посредством изменения толщины слоев и состояния интерфейсов, что позволяет их использовать в устройствах магнитной записи информации [1], элементах спинтроники (например, MRAM), а также в поляризующих элементах нейтронной оптики [2]. Характеристики таких систем во многом зависят от качества границ раздела, которое определяется формированием переходных областей, что делает актуальным исследование взаимосвязи структуры и магнитных свойств многослойных пленок Fe/Co.

В работе исследованы структурные и магнитные свойства многослойных тонкоплёночных наноструктур Fe/Co на подложках SiO₂ или Si(111) в зависимости от толщины слоев (от 4 нм до 52.5 нм). В качестве референсных систем также были исследованы относительно толстые плёнки чистых металлов и бислойные структуры с разным порядком напыления слоёв. Все образцы синтезировались методом магнетронного распыления. Для комплексного исследования использовались методы рентгеновской рефлектометрии и дифракции, фотоэлектронной спектроскопии, а также метод SQUID-магнетометрии.

Установлено, что все образцы сохраняют периодичность; кристаллическая фаза Co изменяется при переходе от тонких слоёв к более толстым. Явных признаков химического взаимодействия Fe и Co в приповерхностных слоях не обнаружено. Выявлено различие магнитных свойств при разных толщинах слоёв. В системе с малым периодом происходит синхронное перемангничивание слоёв при отсутствии эффективных центров закрепления доменных стенок. При увеличении периода структуры происходит переход к независимому перемангничиванию отдельных слоёв или областей с различной анизотропией.

Исследования были проведены на оборудовании ресурсных центров «Рентгенодифракционные методы исследования», «Физические методы исследования поверхности» и «Центр диагностики функциональных материалов для медицины, фармакологии и нанoeлектроники» Научного парка СПбГУ. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ), грант № 24-72-10107.

1. K. Noma, et al. // Ultra-high magnetic moment films for write head, in IEEE Transactions on Magnetics, vol. 42, no. 2, pp. 140-144, Feb. 2006.

2. Lin, K.Z., et al. // yMultilayer neutron monochromator-polarizer based on iron. *J. Surf. Investig.* **10**, 687–692 (2016).

Конденсаторные диэлектрики системы $\text{LaAlO}_3\text{-CaTiO}_3\text{-SrTiO}_3$

Пономарев С.Г.*, Базарова В.Е., Верхова Е.Д., Серова Е.К., Хрусталеv А.Н.
РТУ МИРЭА

*ponomarev_s@mirea.ru, psgpsg1@ya.ru, +79257803775

Система твердых растворов $\text{LaAlO}_3\text{-CaTiO}_3$ применяется в качестве керамического диэлектрика (марка ТЛ) при производстве высокочастотных конденсаторов низкого и высокого напряжения [1]. При синтезе такого материала как правило используются методы «мокрой химии» (совместное осаждение компонентов из растворов солей). В работе [2] рассматривалась система $\text{LaAlO}_3\text{-SrTiO}_3$, которая продемонстрировала превосходные показатели диэлектрических свойств (относительная диэлектрическая проницаемость ϵ_r от 40 до 54 и тангенс угла диэлектрических потерь $\text{tg}\delta < 0,001$).

Цель нашей работы: продемонстрировать возможность получения конденсаторного материала системы $\text{LaAlO}_3\text{-CaTiO}_3\text{-SrTiO}_3$ твердофазным методом при использовании нерастворимых карбонатов и оксидов.

Получение целевого продукта проводилось через твердофазный синтез прекурсоров: LaAlO_3 , CaTiO_3 , SrTiO_3 . Синтезированные прекурсоры измельчались до дисперсности 1 – 1,5 мкм. Необходимое количество синтезированных порошков и временное технологическое связующее смешивались, затем прессовались образцы в виде цилиндров диаметром 13 мм и толщиной 2 мм. Обжиг проводился на воздухе при температуре 1450 °С в течение 2 ч. Результаты измерений диэлектрических свойств приведены в таблице 1. Рассматривали материалы состава $M \cdot (\text{LaAlO}_3) + K \cdot (\text{Ca}_{0,033}\text{Sr}_{0,67}\text{TiO}_3)$. Отношение М/К приведено по массе компонентов.

Таблица 1. Характеристики материала $M \cdot (\text{LaAlO}_3) + K \cdot (\text{Ca}_{0,033}\text{Sr}_{0,67}\text{TiO}_3)$

ρ_k – кажущаяся плотность материала, ρ_v – удельное объемное сопротивление

К/М	ρ , г/см ³	ϵ_r 1 кГц	ϵ_r 1 МГц	$\text{tg}\delta$ 1 кГц	$\text{tg}\delta$ 1 МГц	$\rho_v \cdot 10^{-7}$, Ом·м
1/0	4,21	197	196	0,005	0,0009	18
10/1	4,27	131	131	0,003	0,0006	12
7/1	4,36	122	122	0,003	0,0006	10
5/1	4,38	95,5	96	0,001	0,0006	16
3/1	4,51	78	78	0,001	0,0006	12

Исследованная система позволяет получать конденсаторную керамику с заданным значением ϵ_r в диапазоне 80 – 200 с низкими значениями диэлектрических потерь ($\text{tg}\delta < 0,005$).

Исследование выполнено в рамках научно-исследовательской работы по договору № 33/496-24 от 24.07.2024 (Проект «Передовая инженерная школа СВЧ-электроники РТУ МИРЭА»).

1. Ротенберг Б.А. Керамические конденсаторные диэлектрики СПб.: Типография ОАО НИИ «Гириконд», 2000. – 246с.

2. S. Lei, H. Fan, W. Chen, Z Liu, M. Li Structure, Microwave Dielectric Properties, and Novel Low-Temperature Sintering of $x\text{SrTiO}_3\text{-(1-x)LaAlO}_3$ Ceramics with LTCC Application // Journal of the American Ceramic Society. – 2017. – V.100. – N.1. – P. 235-246.

Биорезорбируемая керамика на основе смешанных фосфатов кальция-натрия-магния для регенерации костной тканиЮ. Р. Рассолова^{а,б,*}, А. М. Мурашко^{а,б}, Я. Ю. Филиппов^{б,в}, В. И. Путляев^{а,б}^а Факультет наук о материалах МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, 119991, Россия^б Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, 119991, Россия^в НИИ Механики МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, 119192, Россия*e-mail: rassolovayr@my.msu.ru, +79268548174

Современный регенеративный подход к лечению дефектов кости требует создания биоматериалов, способных постепенно растворяться в срезе организма, замещаясь естественной тканью. Однако низкая растворимость коммерческих аналогов (ГАП и ТКФ) снижает эффективность регенерации. Введение в состав кальций-фосфатных материалов биосовместимых катионов, таких как Mg^{2+} и Na^+ , потенциально позволит повысить скорость их резорбции, причем использование магния дополнительно снижает температуру спекания керамики и средний размер зерна. Для реализации этих преимуществ особый интерес представляет изучение составов сечения $Mg_3(PO_4)_2-Ca_{2.5}Na(PO_4)_2$ (фаза А) в треугольнике $Ca_3(PO_4)_2-Mg_3(PO_4)_2-CaNaPO_4$. Таким образом, целью работы стала разработка резорбируемых материалов костных имплантатов на основе смешанных фосфатов кальция-магния-натрия.

Фазу А получали путем термообработки смеси β -ТКФ ($\beta-Ca_3(PO_4)_2$) и β -ренанита ($\beta-CaNaPO_4$) при 1200 °С в течение 3 часов. Синтез прекурсоров осуществляли помолом пирофосфата кальция, полученного из брусита ($CaHPO_4 \cdot 2H_2O$), с карбонатом кальция или карбонатом натрия с последующей термообработкой. Синтез ортофосфата магния $Mg_3(PO_4)_2$ проводили путем обжига при температуре 1100 °С в течение 6 часов смеси пирофосфата магния, полученного разложением струвита ($NH_4MgPO_4 \cdot 6H_2O$), с оксидом магния. В результате были подготовлены смеси ортофосфата магния и фазы А с шагом в 10 мол. %, которые подвергали термообработке при 900 – 1400 °С с шагом 50 °С.

По совокупности данных рентгенофазового и термического анализа предложен вид изотермического сечения при 1000 °С трехкомпонентной фазовой диаграммы $Ca_3(PO_4)_2 - Mg_3(PO_4)_2 - CaNaPO_4$. Установлено, что смешанный фосфат кальция-магния-натрия состава $Mg_{21}Ca_4Na_4(PO_4)_{18}$ обладает широкой областью гомогенности, что не отмечалось ранее в литературных данных. В то же время введение магния в составы с высоким содержанием фазы А расширяет область ее существования. На бинарном разрезе $Mg_3(PO_4)_2-Ca_{2.5}Na(PO_4)_2$ обнаружено образование низкотемпературного расплава, интенсифицирующего спекание керамики. Согласно данным дилатометрического анализа, спекание образцов с 80 мол. % фазы А начинается около 750 °С. При этом в интервале 900-1000 °С для состава с 40 мол. % фазы А, зафиксирован резкий скачок уплотнения. Подобранный режим спекания – 1000 °С в течение 3 часов позволяет получить материалы с плотностью до 92 %. Наиболее высокие механические характеристики (прочность при сжатии – 180 ± 10 МПа и модуль Юнга – 5.2 ± 0.9 ГПа) характерны для керамики, полученной из составов с 40 мол. % фазы А. По результатам *in vitro* тестов было показано отсутствие цитотоксичности керамических материалов во всем диапазоне составов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ №22-19-00219

Коррозионная стойкость β -титанового сплава Ti-38Zr-11Nb с добавлением серебра

А.Д. Горбенко^{1,2,*}, М.А. Каплан¹, М.А. Севостьянов¹

1 Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук, Москва, 119334 Россия

2 Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет „МИСИС“», Москва, 119049 Россия

*Email: artemgorbenk@yandex.ru, Телефон: +79251825139

В последние десятилетия β -титановые сплавы, легированные биосовместимыми элементами (Zr, Nb, Ta), привлекают особое внимание благодаря низкому модулю упругости, близкому к свойствам костной ткани, и высокой сопротивляемости локальным видам коррозии [1, 2]. Дополнительное введение серебра (Ag), обладающего выраженным антибактериальным действием, открывает перспективы создания имплантатов с пролонгированным противомикробным эффектом. Однако влияние Ag на пассивирующую способность и общую коррозионную стойкость многокомпонентных β -сплавов в физиологических средах изучено недостаточно. В работе представлены результаты исследования структурного состояния и электрохимического поведения сплава Ti-38Zr-11Nb с легированием серебра в диапазоне 1–3 ат. %.

Согласно проведенным исследованиям после проведения коррозионных испытаний в 0,9% растворе NaCl фазовый состав остается стабильным, что свидетельствует о высокой структурной толерантности сплава к легированию серебром. Электрохимические исследования (потенциодинамическая поляризация и хроноамперометрия) показали, что все образцы способны формировать устойчивое пассивное состояние. Однако выявлена четкая корреляция между содержанием Ag и коррозионными параметрами, которые при увеличении доли серебра с 1 до 3 ат. % приводит к снижению коррозионной стойкости и заметному замедлению кинетики пассивации, что выражается в сдвиге потенциала питтингообразования в отрицательную область. Наибольшими защитными свойствами обладает сплав, содержащий минимальное количество серебра (1 ат. %). Для него рассчитана скорость коррозии, которая составляет 0,166 мкм/год, что более чем в 2,4 раза ниже аналогичного показателя для промышленного α + β -сплава ВТ6 (Ti-6Al-4V), скорость коррозии которого в идентичных условиях равна 0,408 мкм/год.

Работа выполнена в рамках выполнения гранта Российского научного фонда № 25-73-00168, <https://rscf.ru/project/25-73-00168/>

[1] Pesode P., Barve S. A review—metastable β titanium alloy for biomedical applications // Journal of Engineering and Applied Science. 2023. Vol. 70. № 1. P. 1–36. DOI: 10.1186/S44147-023-00196-7.

[2] Yang W., Pang S.J., Wang G., Liu Y., Liaw P.K., Zhang T. Ti–Zr–Hf–Nb–Ta–Sn high-entropy alloys with good properties as potential biomaterials // Rare Metals. 2022. Vol. 41. № 7. P. 2305–2315. DOI: 10.1007/S12598-021-01938-3/METRICS.

Влияние режимов термической обработки на структуру и механические свойства биомедицинских титановых сплавов Ti-Nb-Mo

М.Е. Пруцков*¹, С.В. Конушкин¹, М.А. Севостьянов¹, А.Г. Колмаков¹

¹ Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук, Москва, 119334 Россия

E-mail: mprmf@mail.ru

Разработка новых биосовместимых материалов для ортопедии и стоматологии является актуальной задачей. Традиционные сплавы Ti-6Al-4V содержат Al и V, вызывающие нежелательные биологические реакции. Альтернативой являются β -сплавы Ti-Nb-Mo, позволяющие регулировать свойства за счёт термической обработки. Цель работы является исследование структуры и механических свойств сплавов Ti-(11-20)Nb-(1-3)Mo после прокатки и закалки.

Исходные сплавы выплавляли из йодидного титана, ниобия марки Nb-1 и молибдена марки МЧ в аргонодуговой печи с многократным переплавом для достижения гомогенности. Образцы исследовали в четырёх состояниях: после холодной прокатки до конечной толщины 1-1,2 мм, а также после закалки с температур 700, 800 и 900°C (выдержка 10 мин, охлаждение в воду). Микроструктуру изучали методами оптической и сканирующей электронной микроскопии, а фазовый состав методом рентгенофазового анализа (РФА).

РФА показал, что после прокатки наблюдаются уширенные рефлексы из-за деформации, обусловленные деформационными искажениями кристаллической решётки. Закалка при 800-900°C приводит к сужению рефлексов, снятию внутренних напряжений, рекристаллизации и фазовому переходу из объёмно-центрированной кубической (ОЦК) в гранецентрированную кубическую (ГЦК) фазу. Механические испытания выявили: увеличение Nb и Mo повышает пластичность (до 45-50%), но снижает прочность. Сплав Ti-11Nb-1Mo после прокатки сочетает высокую прочность (961 МПа) и пластичность (8,8%) при низком модуле Юнга (56 ГПа). Сплав Ti-20Nb-2Mo после закалки с 800°C демонстрирует пластичность 25%, прочность ~500 МПа и модуль Юнга 64 ГПа, проявляя эффект сверхупругости.

Проведённые исследования методами электронной микроскопии и РФА позволили обосновать выбор двух перспективных титановых сплавов медицинского назначения, а именно Ti-11Nb-1Mo в состоянии после холодной прокатки (высокопрочный, низко модульный) и Ti-20Nb-2Mo после закалки с 800 °C (высокопластичный, сверхупругий). Указанные сплавы рекомендуются для дальнейших разработок в области остеопластики и эндопротезирования.

Исследование выполнено в рамках государственного задания № 075-00320-26-00.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Kligman S. et al. The impact of dental implant surface modifications on osseointegration and biofilm formation // Journal of clinical medicine. 2021. V. 10. № 8. P. 1641.
2. Pandey A., Awasthi A., Saxena K.K. Metallic implants with properties and latest production techniques: a review // Advances in Materials and Processing Technologies. 2020. V. 6. № 2. P. 405-440.

С.А. Солдатенко^{а*}, С.Б. Куцев^а, В.О. Текутьева^б, Е.К. Белоногов^{а,в}^аФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»,
Воронеж, 394006 Россия^бВУНЦ ВВС «Военно-воздушная академия им. профессора Н.Е. Жуковского и
Ю.А. Гагарина», Воронеж 394064, Россия^вФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия*e-mail: cossack408@mail.ru, +79518650433

На основе кристаллогеометрических критериев проведен анализ наблюдаемых ориентаций кристаллитов β -SiC, синтезированных при фотонной карбидизации кремния. Установлено, что на межфазной границе (МГ) возникают ориентационные соотношения, отвечающие критерию – совпадение плотноупакованных плоскостей и направлений. На МГ β -SiC/(111)Si реализуются ориентационные соотношения (рис.1а) с аксиальными текстурами $\langle 111 \rangle$ и $\langle 112 \rangle$. Множественные ориентационные соотношения – принципиальный запрет на получение одноориентационных эпитаксиальных плёнок β -SiC на (111)Si. Результаты ПЭМ высокого разрешения (рис 1б) свидетельствуют о высокой плотности дефектов упаковки в зёрнах плёнки β -SiC и малой плотности дислокаций на МГ.

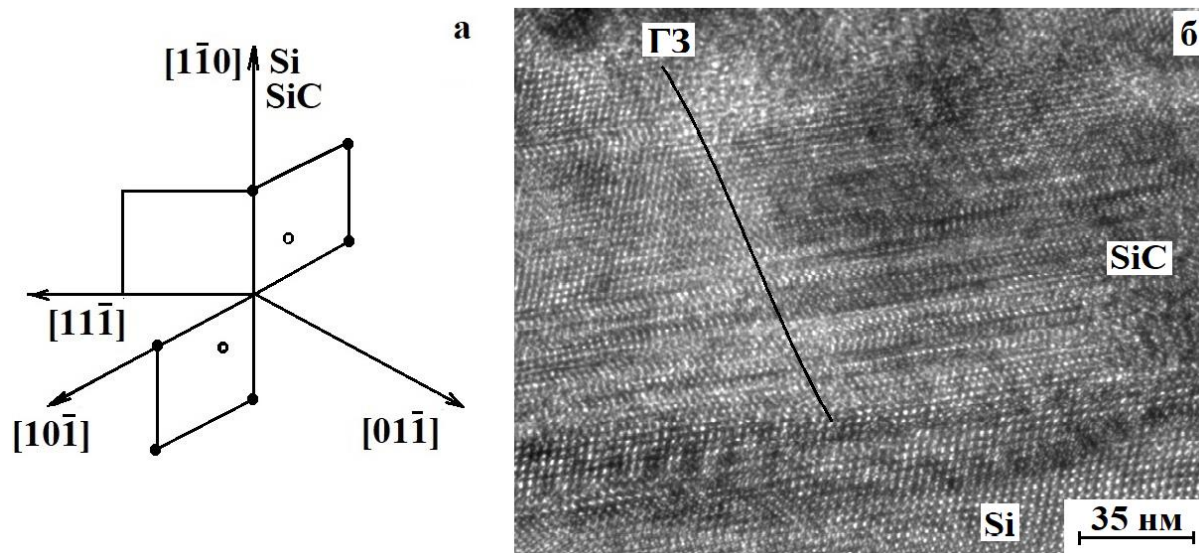


Рис.1. Схема сопряжения кристаллитов β -SiC с высокой плотностью совпадения узлов (а) и ПЭМ-изображение высокого разрешения гетероструктуры β -SiC/(111) Si (б)

Термические напряжения сжатия в пленке β -SiC из-за разных ТКР β -SiC и Si приводят к двойникованию и появлению ориентаций $\langle 115 \rangle$ и $\langle 110 \rangle$ β -SiC.

Таким образом, концепции РСУ и О-решетки применимы для прогнозирования ориентационных соотношений для системы β -SiC/(111)Si с большим размерным и структурным несоответствием сопрягающихся фаз. Несоответствие на МГ β -SiC/(111)Si устраняется двойниками и дефектами упаковки β -SiC ростового происхождения. Сопряжение решёток на МГ некогерентное. Нанокристаллическая субструктура пленок SiC обусловлена множественным зарождением эквивалентных ориентаций и высокой скоростью процесса при фотонной карбидизации.

Синтез и газочувствительные свойства нанопорошков кобальтита иттрия, легированных ионами никеля (2+)

А. А. Суркова^{а,*}, В. Ф. Кострюков^а

^а *ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018
Россия*

**e-mail: anastasiasurok@gmail.com, +79204469358*

В работе исследована возможность и условия синтеза нанопорошков кобальтита иттрия YCoO_3 со структурой перовскита цитратным методом. Оптимальными условиями стали: применение гидроксида аммония NH_4OH в качестве осадителя, отжиг при температуре 900°C в течении 7 часов. Наличие целевой фазы было подтверждено результатами рентгенофазового анализа.

Подтвержденная методика использовалась для синтеза образцов $\text{YCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$ со степенью легирования x , равной 0, 5 и 15%, с целью исследования влияния ионов никеля Ni^{2+} на газочувствительные свойства в присутствии угарного газа и паров аммиака. Элементный и фазовый состав образцов подтверждён рентгенофазовым анализом (РФА) и локальным рентгеноспектральным микроанализом (ЛРСМА). Методом РФА подтверждено образование перовскитной фазы YCoO_3 . Легирование никелем приводит к встраиванию ионов Ni^{2+} в позицию кобальта с незначительным образованием примесной фазы Co_2O_3 . Рассчитанные размеры кристаллитов составляют 44–73 нм, степень дефектности образцов не превышает 0,002, что свидетельствует о высокой кристалличности полученных наноматериалов. Данные ЛРСМА подтвердили, что реальный элементный состав синтезированных образцов близок к номинальному. Выявлен недостаток атомов кислорода, что может образовывать дополнительные активные центры и благоприятно влиять на газочувствительные свойства.

Методом Ван дер Пау был зафиксирован отклик у плёнок кобальтита иттрия легированных никелем на присутствие CO и паров NH_3 . Синтезированные материалы проявляют газочувствительность к CO и NH_3 (50 ppm). Для $\text{YCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$ максимальный абсолютный отклик на присутствие угарного газа (CO) наблюдается при 200°C и составляет $S_{\text{абс}} \approx 2,75$, в присутствии паров аммиака (NH_3) при температуре 280°C $S_{\text{абс}} \approx 3,38$. Легирование никелем улучшает газочувствительные свойства пленок на основе нанопорошков кобальтита иттрия легированных никелем. Относительный сенсорный сигнал составил 5,7–63,7% (CO) и 6,2–70,4% (NH_3).

$\text{YNi}_{0,15}\text{Co}_{0,85}\text{O}_3$ имеет наиболее высокие показатели сенсорного отклика, однако проявляет их при достаточно высоких температурах, обладает селективностью к исследуемым газам, что говорит о перспективности данного материала для использования в качестве детектора в полупроводниковых газовых сенсорах.

М. В. Ткаченко, Н. Б. Морозова*, А. В. Введенский

*ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия***e-mail: mnb@chem.vsu.ru, +79803405880*

Среди технологий, используемых для очистки водорода, выделяют мембранное разделение, которое обладает низкими энергозатратами и невысокими эксплуатационными расходами. В качестве материалов для этих целей рассматриваются металлические мембраны на основе палладия. Введение в состав палладия рутения в качестве легирующего компонента позволяет улучшить механические свойства материала. Важно отметить, что водородопроницаемость сплавов с содержанием рутения от 4,5 до 10 масс. % сопоставима с проницаемостью чистого палладия. Цель работы заключалась в анализе электрохимического поведения в щелочной и кислой средах сплава Pd6Ru и определении параметров его водородопроницаемости.

Для проведения эксперимента выбрана фольга сплава Pd6Ru (масс. % Ru), полученная методом магнетронного распыления в вакууме на подложку из SiO₂ при температуре 700 К. Толщина анализируемой фольги составляла 7,5 мкм. Для проведения электрохимических измерений образец фольги сплава обезжиривался и крепился на электрод из спектрально чистого графита. Исследования проводились в водных деаэрированных растворах 0,1М КОН и 0,1М H₂SO₄ методами циклической вольтамперометрии и двухступенчатой катодно-анодной хроноамперометрии с использованием потенциостата Р-20Х.

Электрохимическое поведение фольги сплава Pd6Ru различно на разных сторонах поверхности. Глянцевая сторона фольги, обращенная к подложке, оказалась нечувствительна к процессу ионизации атомарного водорода в щелочной среде. Это проявляется в отсутствии пика ионизации на циклических вольтамперограммах. В кислой среде пик ионизации более размыт. Матовая сторона фольги проявляет более выраженные каталитические свойства по отношению к реакции выделения водорода.

Установлено, что в 0,1М КОН при увеличении времени наводороживания (t_c) как катодные, так и анодные спады тока снижаются в 5–6 раз. Снижение скорости внедрения и ионизации связано с адсорбцией OH⁻-ионов, которая приводит к снижению активных центров на поверхности фольги. Скорость внедрения и ионизации атомарного водорода в 0,1М H₂SO₄ на исследуемом сплаве происходит при более высоких скоростях. При увеличении t_c в кислой среде наблюдается рост скоростей внедрения и ионизации, тогда как в щелочной среде – подавление обоих процессов.

Установлено, что водородопроницаемость и константа скорости инжекции водорода из фольги сплава Pd6Ru в обоих средах, одинаковы по результатам катодных спадов тока. Изменение концентрации атомарного водорода в сплаве, рассчитанной по анодным спадам тока, как для кислой, так и для щелочной среды выше, полученной по катодным спадам. В кислой среде коэффициент диффузии на матовой стороне поверхности превышает D_H , рассчитанный на глянцевой, однако изменения не очень велики. Данные D_H рассчитанные по катодным и анодным спадам тока практически не изменяются. А в щелочной среде коэффициент диффузии по результатам анодных спадов почти в 2 раза превышает рассчитанный по катодным спадам. Фазограничный обмен в кислой среде легче происходит в случае матовой стороны поверхности, а в щелочной среде – в случае одиночной хроноамперограммы.

Эффект Наими в титановом сплаве ВТ6

Д.О. Фролов^{1,2,*}, С.С. Манохин², Ю.Р. Колобов²

¹ Тульский государственный университет, г. Тула, РФ

² ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, г. Черноголовка, РФ

*E-mail: fdolegovich@yandex.ru, тел.: 8(4872) 25-79-28, факс: 8(4872) 35-81-81

Исследование посвящено изучению механических свойств титанового сплава ВТ6 на основе системы Ti-6Al-4.5V (рис.1) методом внутреннего трения.

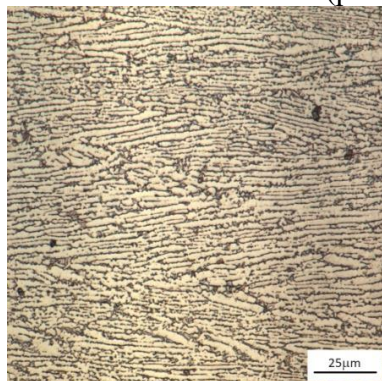


Рис. 1. Микроструктура сплава ВТ6 (лазерная микроскопия), светлые пластины (α -фаза), темные тонкие прослойки (β -фаза)

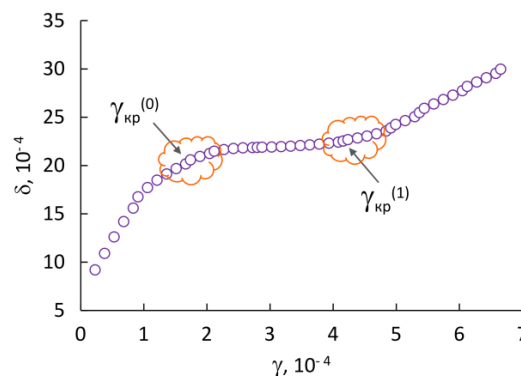


Рис. 2. Амплитудная зависимость внутреннего трения, δ - логарифмический декремент

затухания, $f \approx 2$ Гц, $T = 20^\circ\text{C}$

На амплитудной зависимости внутреннего трения (рис. 2), состоящей из трех областей, обнаружен подъём Наими [1] – эффект дислокационной неупругости при малой деформации не превосходящей $\gamma_{\text{кр}}^{(0)}$, связанный с самым ранним этапом движения дислокаций на расстояния $\sim$ параметра решётки. Физически данный подъём соответствует режиму, когда амплитуда деформации ещё недостаточна для полного отрыва дислокационных сегментов от точечных стопоров (атомов легирующих элементов и вакансий), но ангармонизм вынужденных колебаний дислокационных сегментов уже вносит заметный вклад в диссипацию энергии. В этой области наблюдается своего рода атермическое преодоление дислокациями потенциального барьера, обусловленного обобщёнными силами трения покоя. Поскольку подобный спектр наблюдался ранее и в бериллии [2], у которого ГПУ кристаллическая решётка (равно как и у α -фазы), эффект Наими может быть результатом вклада в демпфирование именно α -фазы, в то время как стабилизация декремента δ во второй области, может быть вызвана действием β -фазы, поскольку в сплаве обе фазы влияют на рассеяние энергии. Кроме того, выполнен анализ температурной зависимости внутреннего трения и построена температурно-силовая карта.

Исследование выполнено по теме Государственного задания ФИЦ ПХФ и МХ РАН (FFSG-2024-0016), рег. №124020500064-2.

Список цитируемой литературы

1. Naimi E.K. The Amplitude Dependence of Internal Friction and the Young's Modulus Defect in Solids Due to Anharmonism of Dislocation Motion at Low Vibration Amplitudes. *Physica Status Solidi*. – 1982. – Vol. A72, No. 2. – p. 825.
2. Канунникова И.Ю. Механизмы микропластичности, дислокационной неупругости и упрочнения твердых растворов ОЦК и ГПУ металлов с низким пределом растворимости: автореферат дис. ... кандидата технических наук: 05.16.01. – Тула, 1993. – 20 с.

Термоградиентный синтез и физико-химические, прикладные свойства высокодисперсных фторуглеродных соединений

А.К. Цветников*

*ФГБУН Институт химии Дальневосточного отделения Российской академии наук,
Владивосток, 690022 Россия**e-mail: tsvetnikov@ich.dvo.ru, +79147905869

В работе представлен оригинальный метод термоградиентного синтеза (ТГС) высокодисперсных природных и искусственных фторуглеродов [1]. Методами сканирующей электронной микроскопии, энергодисперсионной спектроскопии, ИК-спектроскопии хромато-масс-спектрометрии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии проведены исследования синтезированных соединений. Прикладные испытания фторуглеродных материалов показали перспективность их применения в качестве энергоемких катодных материалов для литиевых и натриевых химических источников тока, пьезоэлектрических материалов, а также гидрофобных, антифрикционных, противоизносных покрытий и компонентов защитных композитов.

ТГС-метод позволяет получать неустойчивые при температуре получения химические соединения, например, PtF_6 и высокодисперсные: терморасширенный графит, оксофториды графита, фторированный лигнин, политетрафторэтилен и др. Интеркалирование высших фторидов переходных металлов в ТРГ протекает с большей скоростью и степенью интеркалирования, чем в обычный графит. Катодные материалы для вторичных литиевых химических источников тока (ЛХИТ) на основе интеркалированных соединений обладают способностью к циклированию, высокой энергоемкостью и током разряда (1224 Вт·ч/кг для C_8PtF_6). Оксофториды графита $\text{C}_8\text{O}_{4,6}\text{F}_{2,2}$ и фторированный лигнин $\text{C}_9\text{O}_{5,8}\text{F}_{5,9}$ в качестве катодов для первичных ЛХИТ обладают более чем в два раза высокой энергоемкостью по сравнению с фторграфитом CF (4626, 4860 и 2260 Вт·ч/кг соответственно). Ксерогели фтороксидов графита обладают выраженным пьезоэлектрическим эффектом $d_{33} = 4,3 \cdot 10^{-11}$ Кл/н для $\text{C}_8\text{O}_4\text{F}_2$ [2]. Термодеструкция политетрафторэтилена (ПТФЭ) в режиме ТГС протекает с образованием ультрадисперсного ПТФЭ (УПТФЭ) с размером сферических наноструктурированных частиц ~ 1 мкм, содержащего молекулы фторполимера различной молекулярной массы от 300 до 5000 а.е.м. В отличие от ПТФЭ УПТФЭ состоит из предельных и непредельных молекул, что позволяет модифицировать полученный фторполимер с целью улучшения эксплуатационных свойств, например, снизить поверхностную энергию до рекордных значений ($6,2 \pm 0,5$ мН/м) [3].

Разработана уникальная ТГС-технология и на базе малого инновационного предприятия налажен выпуск товарной продукции на основе УПТФЭ для снижения коэффициента трения, повышения износостойкости деталей машин и механизмов, защитных антиобледенительных, противообрастающих и антикоррозионных покрытий для морских судов и сооружений, лыжных и оружейных смазок [4].

1. Цветников А.К. // Вестник ДВО РАН. 2009. - №2. – С. 18-22.

2. Цветников А.К. // Вестник ДВО РАН, 2021. №5. С. 79-94. DOI: 10.37102/0869-769820212190507.

3. Цветников А.К. Матвеев Л.А., Егоркин В.С., Короченцев В.В., Игнатьева Л.Н. // Химическая физика. 2025; № 44(11) С. 116-128. DOI: 10.31857/S0207401X25110018.

4. Бузник В.М., Хатилов С.А., Цветников А.К. // Высокомолекулярные соединения. Серия А. 2025. № 67(1) С. 30-40

А. А. Ширяев^{а,*}^а *Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, Москва, 119071 Россия*^{*}*e-mail: a_shiryaev@mail.ru, +74959554664*

В докладе представлены результаты изучения обширной коллекции дисперсных и объемных алмазов с наноразмерными зернами комплексом спектроскопических и структурных методов. Исследовались как природные наноалмазы, выделенные из метеоритов и земных пород, претерпевших ударное воздействие, так и алмазы, синтезированные при высоких статических и динамических давлениях. При исследовании метеоритных наноалмазов была показана возможность введения примеси кремния в решетку зерен с образованием люминесцирующих дефектов SiV. Продемонстрирован одно-фотонный характер свечения таких дефектов (single photon emitter) даже в зернах диаметром менее 2 нм. Экспериментально показана возможность создания наноалмазов с дефектами SiV путем синтеза при высоких статических РТ-параметрах из кремний-органических соединений.

Значительный фундаментальный и прикладной интерес представляют не только дисперсные наноалмазы, но и объемные материалы, состоящие из наноалмазных кристаллитов. Их синтез возможен при высоких статических РТ-параметрах в лаборатории. Интересным фактом является обнаружение подобных алмазных «спеков» природного происхождения в породах, подвергшихся интенсивному ударному преобразованию. Представлены результаты структурного и спектроскопического исследования как природных, так и синтетических объемных наноалмазов.

В ходе изучения природных макрокристаллов алмаза были обнаружены наноразмерные включения различной природы. Одними из самых интересных являются включения сжатого СО₂-льда. В некоторых природных макроалмазов впервые обнаружены наноразмерные полости, имеющие форму сильно уплощенного ромбоэдра; их образование может быть связано с процессами деформации. Спектры фотolumинесценции этих кристаллов характеризуются набором узких интенсивных линий, ранее не наблюдавшихся в алмазе. Аналогичные семейства линий ранее наблюдались в спектрах наноалмазов с наводороженными поверхностями. Предположительно, необычное поведение люминесцентных линий в исследованном кристалле может объясняться рекомбинационными процессами на поверхности обнаруженных нанополостей.

Каркас фуллеренов образует полость, размеры которой варьируются от 0,4 до 1 нм при переходе от C₆₀ к C₂₄₀ [1]. Фуллерены могут содержать атомы или более сложные частицы внутри этой полости. Особый интерес представляют эндоэдральные металлофуллерены (ЭМФ), поскольку электронный перенос между атомом металла и углеродным каркасом приводит к существенному изменению электронных и магнитных свойств исходного фуллерена [1]. Уникальные свойства ЭМФ дают возможность использовать данные структуры в таких областях как ЯМР-томография и спинтроника [2]. Диметаллофуллерены образуются в результате синтеза электродуговым методом вместе с монометаллофуллеренами, однако их выход существенно ниже [1] и они гораздо менее изучены.

В данной работе представлены результаты DFT-моделирования эндофуллерена Sc₂@C₈₂. Расчёты выполнены с использованием пакета Orca 6.1.0 [3]. Установлено, что наиболее стабильную форму образует 8-й изомер C₈₂ (рис. 1). Мультиплетность основного состояния равна 1. В рамках NBO-анализа [4] установлено наличие ковалентной связи Sc-Sc, образованной за счёт перекрывания гибридных орбиталей $sp^{0.68}d^{1.02}f^{0.01}$.

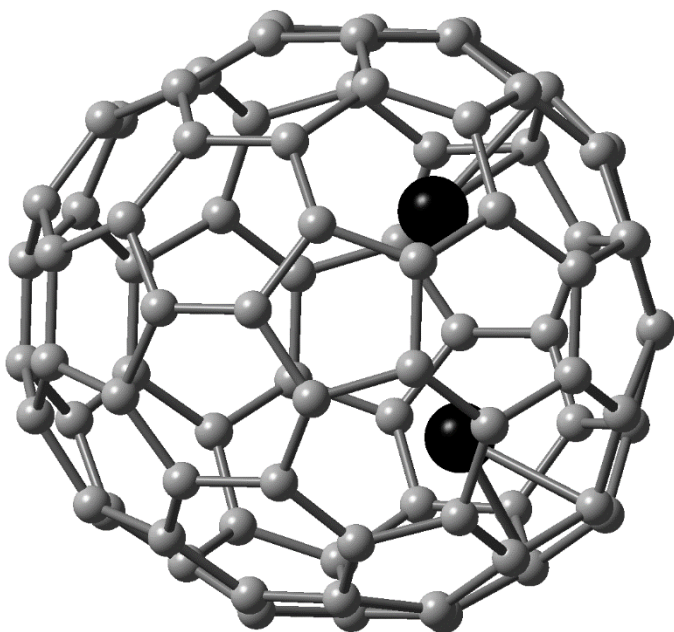


Рисунок 1. Структура наиболее устойчивого изомера Sc₂@C₈₂

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shinohara H. Endohedral metallofullerenes / Rep. Prog. Phys. 2000. V. 63. P. 843-892.
 2. W. Harneit [et al.] Architectures for a spin quantum computer based on endohedral fullerenes / Physica status solidi (b). 2002. V. 233. P. 453-461.
 3. Neese F. The ORCA Program System. Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci. 2012. V. 2. P. 73-78.
 4. Reed A.E., Curtiss L.A., Weinhold F. Intermolecular Interactions from a Natural Bond Orbital, Donor-Acceptor Viewpoint / Chem. Rev. 1988. V. 88. P. 899-926.
- УДК 539.216:539.213

Композитные покрытия с анодно-оксидной матрицей на пористых порошковых материалах из губчатого титана

Н. М. Яковлева*, К. С. Степанова, И. Н. Дмитриев, А. Н. Кокатев

*ФГБОУ ВО «Петрозаводский государственный университет»,
Петрозаводск, 185910, Россия*

*e-mail: nmyakov@petrsu.ru, +78142719676

В работе обобщены результаты комплексного исследования синтеза микро- и наноструктурированных анодно-оксидных покрытий (АОП) на пористых порошковых материалах из губчатого титана (ППМ ГТ), исходно имеющих высокую удельную поверхность порядка $1350 \text{ см}^2/\text{г}$ [1]. Установлены [1 - 3] условия анодной обработки образцов ППМ ГТ в водном электролите $10\% \text{ H}_2\text{SO}_4 + 0.15\% \text{ HF}$, приводящие к формированию как самоорганизованных нанотрубчатых слоев TiO_2 [1], так и АОП с иерархической микронаноструктурой, содержащих микроконусы (МКК) анатаза [2]. На основе полученных данных предложен механизм образования "шишкоподобных" микронаноструктур $\alpha\text{-TiO}_2$. На следующем этапе разработана специальная методика анодирования ППМ ГТ, позволяющая синтезировать оксидное покрытие, содержащее 82% хорошо сформированных МКК с эффективными диаметрами оснований $d_{\text{эф}}$ от 2 до 3,5 мкм.

Рассмотрен вопрос модификации диоксидом марганца титаноксидных матриц различной морфологии, сформированных на образцах ППМ ГТ. Установлено, что для получения композита $\text{Ti/TiO}_2/\text{MnO}_2$ с наибольшим содержанием марганца (от 9 до 15 масс.%), следует осуществлять модификацию анодированных образцов ППМ ГТ методом химического взаимодействия перманганата калия с перекисью водорода [3]. Показано, что применение данной методики модификации позволяет синтезировать ультрадисперсный MnO_2 и сохранить высокую удельную поверхность композита $\text{Ti/TiO}_2/\text{MnO}_2$, что перспективно для создания каталитически и фотокаталитически активных покрытий на пористых порошковых материалах из губчатого титана, кроме того, кристаллическая структура и высокая пористость делают данный композит привлекательным для применения в создании высокоэффективных суперконденсаторов.

Таким образом, разработаны физические основы анодной модификации ППМ ГТ, определяющие условия формирования нано- и микроструктурированных слоев TiO_2 разной степени кристалличности, которые могут быть использованы для создания как матриц нанокompозитных покрытий различной функциональности, так и биоактивных порошковых имплантатов.

1. Кокатев А. Н. и др. // Журнал технической физики, 2018, том 88, вып.9, с.1377-1383.
2. Яковлева Н.М. и др. // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2022. – Т. 24 (4). – С. 572–583.
3. Яковлева Н. М. и др. // Новые материалы и технологии: порошковая металлургия, композиционные материалы, защитные покрытия, сварка : материалы 17-й Междунар. науч.-техн. конф. (Минск, 20–22 мая 2026 г.) / Нац.акад. наук Беларуси [и др.] ; редкол.: А.Ф. Ильющенко (гл.ред) [и др.]. – Минск : Беларуская навука, 2026. С. 413–417.

Стендовые доклады

Морфология поверхности протонообменной мембраны МФ-4СК

Акберова Э.М.¹, Васильева В.И.²

¹ФГКВОУ ВПО «Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина»

²ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»
elmara_09@inbox.ru

В качестве протонного проводника в низкотемпературных водородно-воздушных топливных элементах часто используют перфторированные гомогенные сульфокатионообменные мембраны типа Nafion (DuPont, США) или их аналог отечественного производства МФ-4СК (ОАО «Пластполимер», Россия). В работе микроскопическими методами исследована морфология поверхности коммерческой мембраны МФ-4СК и ее кондиционированного образца. Визуализацию поверхности проводили с использованием растрового электронного микроскопа JSM-6380 LV (Япония) с напылением золота на сухие образцы в режиме вторичных электронов и атомно-силового микроскопа SolverP47 Pro (Россия, Зеленоград) в полуконтактном режиме на сухих образцах.

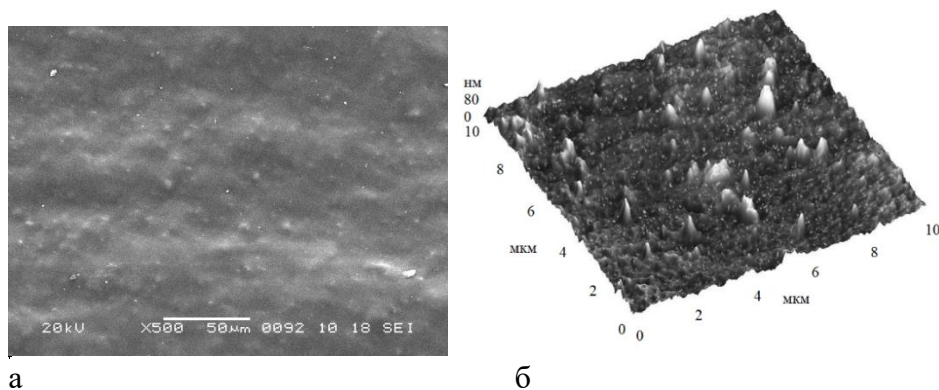


Рис. Изображения поверхности сухих образцов мембраны МФ-4СК, полученные методами РЭМ (а) и АСМ (б). Образцы: а) коммерческий, б) кондиционированный.

Микрофотография (рис. а) гомогенной мембраны МФ-4СК демонстрирует достаточную однородность образца, однако на поверхности визуализируются выпуклости и впадины ионообменного материала. Известно о негомогенности поверхности подобных мембран на наноуровне, которая сохраняется после насыщения образца водой в равновесных условиях. Порограммы для кондиционированного образца мембраны МФ-4СК свидетельствуют о «размерном эффекте» распределения пор по радиусам. При масштабах до 10×10 мкм (рис. б) для гомогенной мембраны МФ-4СК макропоры не проявляются, а максимум на кривых распределения находится в области нано- ($r < 1.5$ нм) и мезопор ($1.5 \text{ нм} < r < 100$ нм), относительное суммарное содержание которых составляет 93.8–99.5%. Полученные результаты согласуются с данными метода эталонной порометрии [1], согласно которому для мембраны МФ-4СК основной объем пор приходится на нано- и мезопоры с $r < 10$ нм. Разрешающая способность метода АСМ в латеральном направлении с использованием зонда радиусом кривизны острия 10 нм не позволила зафиксировать тонкие изменения рельефа и достоверно выделить долю нанопор. С увеличением масштаба сканирования возможность обнаружения мелких пор также уменьшается, и при масштабах более 40×40 мкм основное количество пор для мембраны МФ-4СК зафиксировано в макропористом диапазоне ($r > 100$ нм).

[1] Вольфович Ю.М. Влияние структуры пористых компонентов электрохимических устройств на их характеристики (обзор) // Электрохимия. 2023. Т. 59. № 5. С. 249–328.

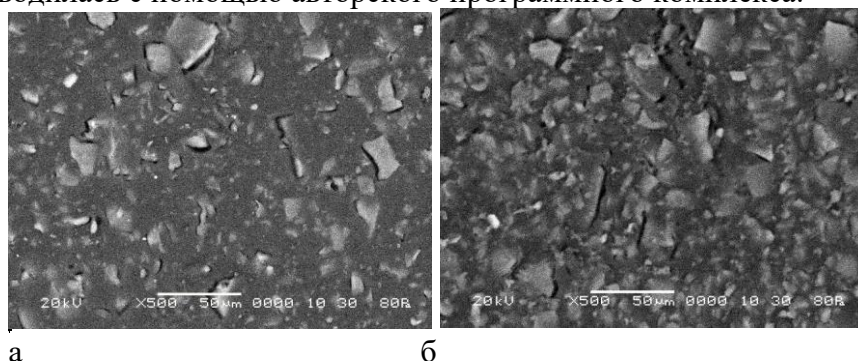
Структурная неоднородность экспериментальных гетерогенных мембран RALEX AM PES И МА-41 с разным содержанием анионообменной смолы

Акберова Э.М.^{1,2}, Васильева В.И.², Добрыдень С.В.²

¹ФГКВОУ ВПО «Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина»,

²ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»
elmara_09@inbox.ru

Цель работы состояла в изучении влияния изменения содержания анионообменной смолы в экспериментальных гетерогенных мембранах Ralex AM Pes и МА-41 на их структурные характеристики методом растровой электронной микроскопии. Объекты исследования – образцы гетерогенных мембран Ralex AM Pes («MEGA» a.s., Чехия) и МА-41 (ООО «ИП «Щекиноазот», Россия) – различались соотношением сильноосновного анионообменника и инертного связующего полиэтилена. При изготовлении мембран AM Pes доля анионообменника варьировалась от 45 до 65 масс. %. В состав образцов мембраны МА-41 входило от 55 до 69 масс. % смолы. Для придания механической прочности образцы мембран AM Pes армированы тканью полиэстер, мембраны МА-41 – капроном. Для визуализации и количественной оценки структурных характеристик поверхности и сечения набухших образцов мембран применяли микроскоп JSM-6380 LV (JEOL, Япония). Количественная оценка доли ионообменного материала и пористости на поверхности и в срезе мембран проводилась с помощью авторского программного комплекса.



а

б

Рис. РЭМ-изображения поверхности набухших образцов экспериментальных мембран AM Pes с долей анионообменной смолы 45 (а) и 65 (б) масс. % при увеличении 500.

Информация об увеличении массовой доли ионообменной смолы в мембранах подтверждена результатами исследований морфологии их поверхности и среза. Установлено, что при увеличении содержания смолы в экспериментальных мембранах наиболее значимыми изменениями структуры являются рост доли проводящей фазы и макропористости (рис.). С ростом содержания анионообменника в составе мембран AM Pes от 45 до 65 масс. % установлено увеличение доли проводящих участков на поверхности от 21 до 34%, в срезе – от 22 до 30 %. По сравнению с зарубежными мембранами образцы отечественных мембран характеризовались меньшей долей проводящей фазы на поверхности, но большей в поперечном сечении. Доля ионообменника на поверхности составляет 10 и 17 % для мембран МА-41 с минимальным (55 масс. %) и максимальным (69 масс. %) содержанием смолы, в то время как в срезе – 45 и 50 % соответственно. При этом величина средневзвешенных радиусов ионообменника и макропор для мембран с разным содержанием анионообменной смолы на поверхности всех исследуемых образцов оставалась постоянной в пределах ошибки измерения.

Исследование микроструктуры микронных и субмикронных частиц ватерита методом 3D ФИП-томографии

В. В. Артемов*, В. И. Бондаренко, Д. Б. Трушина

*Отделение «Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники, НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия
e-mail:artemov@crys.ras.ru, +79165059327

Метод 3D ФИП-томографии (FIB tomography) интенсивно развивается на протяжении последних трёх десятилетий [1,2]. Современные коммерческие системы, созданные благодаря развитию технологий, обеспечивают высокое пространственное разрешение и оснащены стабильным программным обеспечением, позволяющим в автоматическом режиме получать последовательность срезов с шагом в несколько нанометров. В настоящее время ФИП-томография широко применяется для исследования различных объектов — от микроэлектронных устройств до полимерных материалов и биологических образцов.

Карбонат кальция в кристаллической модификации ватерита широко используется в качестве биоразлагаемой матрицы для инкапсулирования и адресной доставки биологически активных веществ. Системы доставки на основе ватерита обладают рядом преимуществ, включая высокую эффективность загрузки, обусловленную развитой пористой структурой и большой удельной поверхностью частиц, а также высокой механической стабильностью и биосовместимостью [3,4]. Несмотря на это, трёхмерная микроструктура таких частиц до настоящего времени практически не изучена. В работе [5] представлены лишь отдельные срезы частиц и результаты просвечивающей электронной микроскопии.

В настоящей работе впервые выполнена трёхмерная реконструкция микроструктуры микронных и субмикронных частиц ватерита методом последовательной послойной резки сфокусированным ионным пучком галлия (рис. 1). Проведена сегментация порового пространства, определены характеристики связности пор, особенности их морфологии и рассчитана доля порового объёма в структуре частиц.

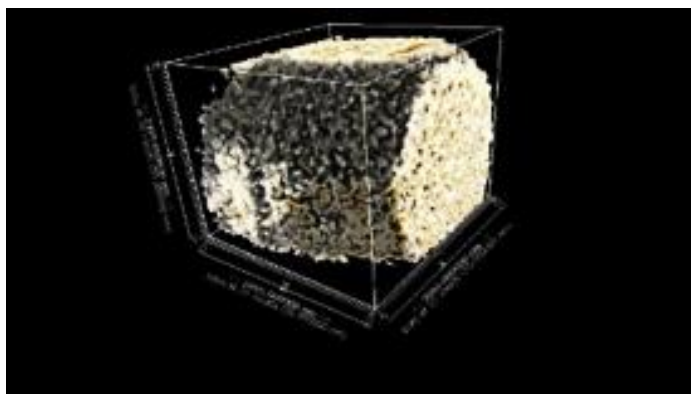


Рис. 1. - Изображение 3D модели матрицы микрочастицы ватерита.

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ “Курчатовский институт” с использованием оборудования ЦКП.

1. Tetsuo SAKAMOTO, Zhaohui CHENG, et al. The Japan Society of Analytical Chemistry .Vol. 47, No. 6, pp. 313-319 (1998)

2. Roldán, D., Redenbach, C., Schladitz, K., Kübel, C., & Schlabach, S. (2024). Image quality evaluation for FIB-SEM images. Journal of Microscopy, 293, 98–117.
<https://doi.org/10.1111/jmi.13254>

Структурно-фазовые превращения в монокристаллическом Si при термомиграции Al

Е.Д. Астрединова^{*а}, К.А. Барков^а, А.А. Скиданов^б, Е.А. Царёва^б, Е.С. Керсновский^а, И.В. Польшин^а, Я.А. Пешков^а

^а ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия

^б АО «ВЗПП-Микрон», Воронеж, 394033, Россия

*e-mail: astredinova@phys.vsu.ru, +79204573692

Актуальной задачей полупроводниковой технологии является создание высоковольтных сильноточных приборов с минимальными потерями. Традиционные диффузионные методы легирования ограничены малой глубиной залегания p - n перехода и длительностью процесса, что сдерживает разработку вертикальных структур для силовой электроники. Альтернативой служит термомиграция (ТМ) алюминия - зонная перекристаллизация в градиенте температуры, обеспечивающая сквозное легирование пластин за минуты [1]. Однако неравновесный характер ТМ может инициировать образование фаз, не предусмотренных равновесной диаграммой состояния Al-Si.

В работе методами рентгеновской дифракции (РД) и ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС) с послойным исследованием на глубинах 35, 60 и 120 нм исследовано фазовое распределение на поверхности кремниевых пластин n -типа после ТМ при 1100 °С. На «стартовой» стороне (исходная поверхность с алюминиевым слоем) зафиксирована двухслойная структура: оксид алюминия Al_2O_3 в верхнем слое до 60 нм и металлический Al на глубине 120 нм. На «финишной» стороне (после выхода расплава) установлен градиентный характер: от кристаллического кремния в слое 35 нм к метастабильной фазе Al_3Si [2] (содержание до 80 % от общего числа атомов Si) на глубинах 60–120 нм в сочетании с поликристаллическим Al и незначительным количеством Al_2O_3 . Обнаружение метастабильной фазы силицида свидетельствует о кинетически неравновесном механизме кристаллизации в системе Al-Si, что необходимо учитывать при оптимизации термомиграционных режимов для силовой микроэлектроники.

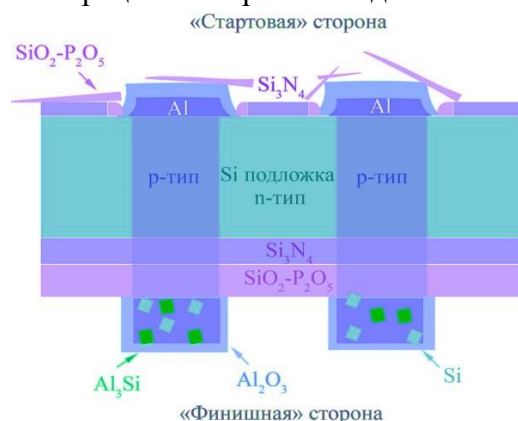


Схема фазового состава приповерхностных слоёв кремниевой пластины после термомиграции Al (данные УМРЭС и РД).

1. В.Н. Лозовский и др. // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2015. Т. 18, № 3. С.179—188/
2. V.A. Terekhov et al. // Phys. Solid State. 2018. V.60. P. 1021-1028.

О.М. Жигалина^{а,*}, Д.Н. Хмеленин^а, В.Г. Басу^а, Д.С. Серегин^б, К.А. Воротилов^б

^а Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники НИЦ «Курчатовский институт», Москва, 119333, Россия

^б МИРЭА – Российский технологический университет (РТУ МИРЭА), Москва, 119454, Россия

e-mail: zhigal@ns.crys.ras.ru, +74991350010

Современные исследования в области микроэлектроники направлены на изучение пористых структур, например, в композициях на основе цирконата-титаната свинца и оксида титана. Введение пористости позволит управлять пьезо-, пиро- и сегнетоэлектрическими характеристиками, а также создавать нанокompозиты с уникальным набором свойств [1]. Однако, получить упорядоченные пористые структуры с заданными размерами и морфологией пор является сложной задачей. Цель работы — установить влияние отжига на формирование мезопористой структуры пленок PZT и оксида титана на подложках Si и Pt-TiO-SiO-Si. Для поставленной цели решались 3 задачи: визуализация структуры методами электронной микроскопии после отжига при 400, 500 и 600 °C, анализ эволюции пор и фазовых превращений и распределения хим. элементов, а также сравнительный анализ структур на двух типах подложек.

Пленки TiO_2 были получены методом химического осаждения из растворов с использованием ПАВ Pluronic L61 и F127 в качестве порогена. Образцы наносили на подложки Si и Pt-TiO-SiO-Si, после чего отжигали при $T = 400, 500, 600$ °C.

Исследования структуры пленок и межфазных границ выполнены комплексом методов электронной микроскопии — растровой, просвечивающей, высокого разрешения, а также энерго-дисперсионной спектроскопии и электронной дифракции с использованием просвечивающего электронного микроскопа (ПЭМ) Tecnai Osiris (ThermoFischer Scientific) и растрового электронно-ионного (FIB) микроскопа Scios DualBeam (ThermoFischer Scientific). Пробоподготовку выполняли методами фокусированного ионного пучка и ионного травления.

Методами электронной микроскопии установлено влияние отжига на структуру мезопористых пленок TiO_2 и PZT на подложках Si и Pt-TiO-SiO-Si.

У пленок TiO_2 при увеличении температуры отжига происходит изменение морфологии пор: вытянутая параллельно поверхности, затем равноосная и ориентированная перпендикулярно поверхности пленки. У пленок PZT морфология пор зависит от подложки: на Si — более равноосные. Размер пор монотонно увеличивается с повышением температуры отжига во всех композициях.

В образцах TiO-Si поры мигрируют к границам при $T = 600$ °C. В образцах TiO-Pt-TiO-SiO-Si коагуляции на межфазной границе нет. В пленке PZT-Si поры распределены равномерно. Для композиций PZT-Pt-TiO-SiO-Si крупные поры локализованы у подложки.

Динамика роста пор для пленок PZT определяется ростом перовскитных зерен. Динамика роста зерен не зависит от материала подложки и увеличивается от 6 до 8 нм.

1. Seregin D. S. et al. Photocurrent in PZT/TiOx composite film prepared via self-assembly of perovskite matrix and ALD of titania //Materials Chemistry and Physics. – 2025. – Vol. 332. – P. 130224.

Влияние сульфидирования фольги Cu-Pd сплава в процессах инъекции и экстракции атомарного водорода

Д. Б. Агаджанян, Т. В. Бугакова, Н. Б. Морозова*, А. И. Донцов

*e-mail: mnb@chem.vsu.ru, +79803405880

Палладий и сплавы на основе палладия в настоящее время являются наиболее перспективными для изготовления металлических мембран, используемых для получения сверхчистого водорода. Сплавы Cu-Pd имеют преимущество среди других сплавов, исходя из их относительно высокой водородопроницаемости и устойчивости к сере. Воздействие серы подавляет каталитический эффект поверхности палладия и значительно ухудшает водородную проницаемость, в результате чего работа палладиевых мембран сильно ухудшается. Цель данной работы: выявление влияния серосодержащих продуктов на водородопроницаемость фольги холоднокатанного сплава Cu56Pd.

Исследования проведены на фольге холоднокатаного сплава Cu-Pd ($X_{Cu} = 44$ ат.%, $X_{Pd} = 56$ ат.%), представляющих собой β фазу твердого раствора. Образцы получены методом холодной прокатки с последующим отжигом при 950 °С в течении 3 часов. Толщина исследуемой фольги 32 мкм. Исходная фольга подвергалась модификации серой из газовой фазы в муфельной печи в разных режимах (таблица). В результате полученные образцы отличались количеством осажденной серы.

Таблица. Режимы обработки образцов парами серы

Образец	1	2	3	4	5
Температура, °С	300	350	400	450	550
Время выдержки, ч	2	2	2	2	1

Электрохимическое поведение немодифицированного и сульфидированных образцов проводили в деаэрированном водном растворе 0,1М H₂SO₄ методами циклической вольтамперометрии и катодно-анодной хроноамперометрии на потенциостате Р-20Х.

Сера, осажденная на поверхности Cu56Pd, блокирует активные центры адсорбции, подавляя не только ионизацию атомарного водорода, но и процессы адсорбции/десорбции кислорода и окисление/восстановление палладия. Циклирование потенциала приводит к частичному очищению поверхности фольги от серы за счет образования различных серосодержащих продуктов. Применение механической зачистки поверхности подтверждает факт того, что атомы серы не проникают глубоко в сплав, а остаются преимущественно в поверхностном слое фольги. Катодно-анодные хроноамперограммы, соответствующие внедрению и ионизации атомарного водорода, полученные на модифицированном серой сплаве незначительно отличается от полученных на немодифицированных сплавах. Следовательно, можно предположить, что при используемых потенциалах на поверхности фольги не протекает реакций с серосодержащими соединениями. Однако ионизация атомарного водорода подавляется катодным процессом, протекающим в той же области потенциалов. Тенденция изменения параметров наводороживания рассчитанных по хроноамперограммам дает возможность количественно оценить влияние сегрегации палладия на водородопроницаемость вследствие обогащения поверхностного слоя Pd при взаимодействии сплава Cu56Pd с серой при температурах выше 400 °С и его последующего циклирования с устранением серосодержащих соединений с поверхности.

Исследование фазового состава и структуры нанокompозитных пленок Ag-Si, полученных ионно-лучевым распылениемВ. В. Бабаков^{а,*}, К. А. Барков^а, С. А. Ивков^а, Д. Н. Нестеров^а, Г. П. Потуданский^а^а ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия*e-mail: babakow12@mail.ru, +79507637411

В работе исследованы фазовый состав и структура нанокompозитных пленок $\text{Ag}_x\text{Si}_{1-x}$ (толщиной 1 мкм), полученных методом ионно-лучевого распыления составной мишени при неравномерном расположении кремниевых подложек Si (100). Данный подход позволил варьировать атомный состав образцов в широком диапазоне от $\text{Ag}_{80}\text{Si}_{20}$ до $\text{Ag}_{55}\text{Si}_{45}$.

Методами рентгенофазового анализа на дифрактометре PANalytical Empyrean, атомно-силовой микроскопии (Solver P47 NT-MDT), растровой электронной микроскопии (JEOL JSM-6380LV с системой микроанализа INCA 250) и ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии по Si $L_{2,3}$ -спектрам на рентгеновском спектрометре-монокроматоре РСМ-500 при энергии первичных электронов 1kV (глубина анализа ~10 нм) [1] выявлены закономерности формирования нанокompозитной структуры и фазового состава пленок $\text{Ag}_x\text{Si}_{1-x}$. Установлено, что вне зависимости от состава поверхность пленок образована наночастицами серебра размером 10–30 нм, объединенными в конгломераты величиной ~200–400 нм. При этом фаза кристаллического Si в пленках не регистрируется; основная часть кремния находится в виде α -Si и окисляется с образованием диоксида кремния и субоксидов. Наряду с нанокристаллами Ag в пленках обнаружено формирование метастабильной фазы Ag_2Si (Cmcm, 63), что подтверждается как появлением дополнительного рефлекса на дифрактограмме, так и ростом микродеформаций кристаллической решетки. Согласно данным УМРЭС и теоретических расчетов DFT, содержание фазы Ag_2Si увеличивается от ~10 до ~30% (от общего количества атомов кремния) при изменении состава от $\text{Ag}_{80}\text{Si}_{20}$ до $\text{Ag}_{55}\text{Si}_{45}$. При этом в плотности электронных состояний наблюдается резонансный характер взаимодействия Ag d -электронов и Si s,p -электронов.

Показана принципиальная возможность реализации мемристивного эффекта в данных нанокompозитных пленках [2]. Обнаружено, что нанокompозитная структура пленок $\text{Ag}_x\text{Si}_{1-x}$ демонстрирует эффект переключения при напряжении 0,2 В из высокоомного состояния (~1 кОм) в низкоомное (~1 Ом). В работе вычлено формирование фазы Ag_2Si в тонких пленках Ag-Si, что связывается с наблюдаемым резистивным переключением, это, в свою очередь, открывает перспективы для разработки новых материалов и технологий в таких областях, как микроэлектроника и нанотехнологии. Наличие сети проводящих наночастиц серебра в диэлектрической матрице оксидов кремния формирует сложную микроструктуру, определяющую функциональные свойства данных композитов.

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

2. Li R. et al. Physical mechanisms and enhancement of endurance degradation of SiOx: Ag-based volatile memristors //2023 Silicon Nanoelectronics Workshop (SNW). – IEEE, 2023. – С. 117-118.

Анализ фазового состава пленок SIPOS, полученных пиролитическим осаждением моносилана и закиси азота, по данным УМРЭС и РФЭС

К. А. Барков^{а,б*}, С. А. Ивков^{а,б}, А. И. Чукавин^{б,в}, Е.С. Керсновский^{а,б}, И.В. Польшин^{а,б},
Е.И. Гайворонская^{а,б}, М.И. Гайворонская^{а,б}, Е.А. Царева^б, А.А. Скиданов^б

^а ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия

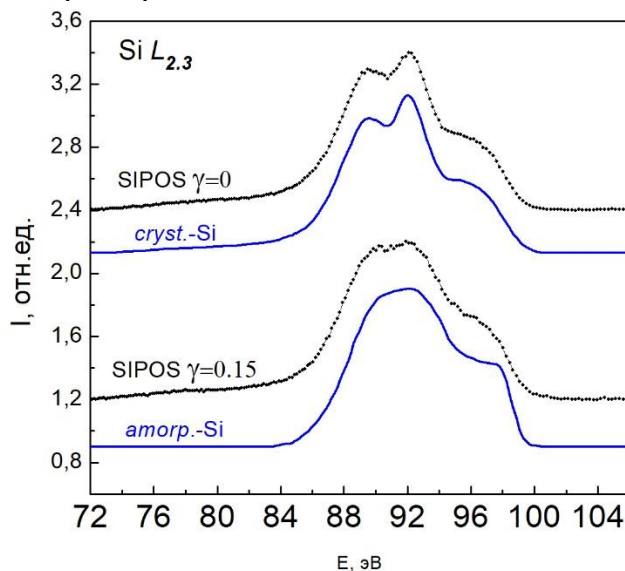
^б АО «ВЗПП-Микрон», Воронеж, 394033 Россия

^в Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук, Ижевск, 426067, Россия

*e-mail: barkov@phys.vsu.ru, +79065887447

В работе был исследован фазовый состав пленок полуизолирующего кремния, легированного кислородом (SIPOS – Semi-Insulating Polycrystalline Oxygen-doped Silicon) при различных концентрациях легирования кислородом. Легирование кислородом пленок SIPOS осуществляется непосредственно в процессе пиролитического осаждения пленок из смеси газов моносилана SiH_4 и закиси азота N_2O . При этом концентрация кислорода в пленках определяется соотношением расходов газов $\gamma = \text{N}_2\text{O}/\text{SiH}_4$.

Результаты исследований методами рентгеновской дифракции, ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) показывают, что пленки SIPOS ($\gamma=0$), полученные методом химического осаждения из газовой фазы SiH_4 без добавления закиси азота N_2O , представляют собой поликристаллического кремния со средним размером кристаллитов $\text{Si} \sim 50$ нм. Добавление в технологический реактор закиси азота в соотношении $\gamma = \text{N}_2\text{O}/\text{SiH}_4 = 0.15$ приводит к формированию композитной пленки аморфного кремния с некоторым содержанием субоксидов кремния SiO_x ($\sim 35\%$) и включениями нанокристаллов кремния со средним размером ~ 5 нм, однако основной является фаза аморфного кремния.



Ультрамягкие рентгеновские эмиссионные $\text{Si } L_{2,3}$ -спектры пленок SIPOS, полученные при различных соотношениях газов $\gamma = \text{N}_2\text{O}/\text{SiH}_4 = 0$ (верхняя кривая) и 0.15 (нижняя кривая), а также эталонные спектры кристаллического и аморфного кремния.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 26-79-40003.

Молекулярно-динамическое исследование механизма пластификации поливинилхлорида эфирами дикарбоновых кислот

Вихарева И.Н., Макаров Г.И.

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия

vikharevain@susu.ru, Тел./факс: +7 (351) 267-99-00

Практическое применение ПВХ требует введения пластификаторов. В связи с экологическими ограничениями фталатов активно разрабатываются альтернативные пластификаторы – диэфиры алифатических дикарбоновых кислот. Для установления связи между структурой эфиров и макроскопическими свойствами композиции применено молекулярно-динамическое (МД) моделирование систем.

Методом конденсации фрагментов (силовое поле GAFF, расчёты в пакете GROMACS) изучены ПВХ-композиции с пятью эфирами: дибутоксипентилглютаратом, дибутоксипентиладипинатом, октилбутоксипентиладипинатом, дибутоксипентилазелаинатом и дибутоксипентилсебагинатом (40 масс.ч. на 100 масс.ч. ПВХ). Проанализированы межмолекулярные взаимодействия (галогенные связи $\text{Cl}\cdots\text{O}$), распределение пластификатора, топология цепей ПВХ, температуры стеклования.

Макроскопическое фазовое расслоение в системах отсутствует, однако на наноуровне обнаружена неоднородность (уменьшение энтропии Шеннона). Выявлены корреляции: число галогенных связей – температура пика механических потерь ($R^2=0,78$); энергия ван-дер-ваальсовых взаимодействий ПВХ–пластификатор – высота пика ($R^2=0,62$). Неоднородность влияет на ширину перехода стеклования.

Выявлены линейные зависимости между энергией электростатических взаимодействий ПВХ–пластификатор и экспериментальной температурой начала разложения ($R^2=0,99$), а также между энергией ван-дер-ваальсовых взаимодействий молекул пластификатора между собой и температурой стеклования ($R^2=0,62$). С ростом длины кислотного остатка уменьшается количество галогенных связей с карбонильными атомами кислорода, что свидетельствует о переходе от механизма, основанного на направленных контактах $\text{Cl}\cdots\text{O}$ (короткие цепи), к механизму объёмного дисперсионного раздвигания цепей ПВХ (длинные цепи). Топологический анализ цепей ПВХ подтверждает, что адипинат (C6) и азелаинат (C9) способствуют спиральной закрутке макромолекул, тогда как себагинат (C10) приводит к более рыхлой и неупорядоченной упаковке, что согласуется с его лучшей низкотемпературной гибкостью.

МД-моделирование позволяет установить количественные связи между молекулярной структурой диэфиров, характером межмолекулярных взаимодействий и макроскопическими свойствами ПВХ-композиций. Полученные корреляции могут служить основой для целенаправленного дизайна экологически безопасных пластификаторов с заданными термостабильностью и низкотемпературной гибкостью. Отмечено, что выводы базируются на ограниченном наборе из пяти пластификаторов и требуют дальнейшей валидации на расширенной выборке.

1. Rahman, M., Brazel, C. The plasticizer market: an assessment of traditional plasticizers and research trends to meet new challenges. Prog. Polym. Sci. 2004, 29, 1223-1248.
2. Vihareva, I.N., Kruchinina, P., Manojlović, D. The effect of dicarboxylic acid structure on the plasticizing ability of its ester. Polymers 2024, 16, 3372.

Структурно-индуцированные магнитные переходы в слоистых дихалькогенидах MoQ_2 ($Q = \text{S, Se, Te}$) и двойных гидроксидов $(\text{M}^{2+})_6\text{Al}_3(\text{OH})_{18}[\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ($\text{M}^{2+} = \text{Mn}^{2+}, \text{Fe}^{2+}$) под действием механических деформаций

Л.М. Волкова

Институт химии ДВО РАН, Владивосток

Мы рассмотрели механическую деформацию как явление, связанное с атомными движениями, и таким образом продемонстрировали возможность регулирования магнитных свойств слоистых ван-дер-ваальсовых материалов путем механического напряжения, приложенного к кристаллическим структурам. Мы рассчитали параметры магнитных взаимодействий J_{ij} в двумерных антиферромагнитных дихалькогенидах MoQ_2 ($Q = \text{S, Se, Te}$) и двойных гидроксидов $(\text{M}^{2+})_6\text{Al}_3(\text{OH})_{18}[\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ($\text{M}^{2+} = \text{Mn}^{2+}, \text{Fe}^{2+}$) и разработали структурно-магнитные модели этих соединений. Мы установили, что некоторые из промежуточных ионов, достигших локального пространства обменного взаимодействия между магнитными ионами, занимают положения, близкие к критическим. Мы продемонстрировали, что даже незначительное смещение этих ионов в результате механического напряжения может привести к переходам антиферромагнетик-ферромагнетик ($\text{AFM} \leftrightarrow \text{FM}$) или абберрантному изменению силы этих магнитных взаимодействий, независимо от того, происходит ли изменение симметрии или нет. Конечно, дихалькогениды переходных металлов действительно служат цели быть источником новых 2D-материалов; однако, широкий спектр двойных гидроксидов на основе переходных металлов должен, по нашему мнению, стать весомым дополнением к списку материалов для спинтроники.

Кристаллохимические исследования и прогноз новых материалов

Л.М. Волкова

Институт химии ДВО РАН, Владивосток

Проблема поиска материалов с нужными свойствами особенно актуальна в наше время стремительного развития принципиально новых форм материи и технологий. Кристаллохимия продолжает занимать одно из первых мест в решении этой проблемы. Главной задачей наших исследований является поиск кристаллохимических корреляций в ряду состав – структура – свойство – функция и прогнозирование на этой основе новых материалов перспективных для практических применений. Для поиска новых магнитных материалов нами был ранее [1] создан новый кристаллохимический метод расчета знака и силы магнитных взаимодействий на основе структурных данных. С помощью этого метода рассчитываются структурно-магнитные модели соединений. Основой этих моделей служат кристаллохимические параметры (кристаллическая структура, заряд и размер ионов). Характеристиками структурно-магнитной модели являются следующие параметры: (1) знак и сила магнитных взаимодействий J_{ij} ; (2) размерность магнитной структуры; (3) наличие магнитных фрустраций (конкуренции магнитных взаимодействий) на специфических геометрических конфигурациях; (4) возможность переориентации магнитных моментов (переход типа антиферромагнетик (AFM) – ферромагнетик (FM)) при смещении промежуточных ионов, локализованных в критических позициях. Структурно-магнитные модели позволяют выявлять основные корреляционные соотношения между структурой и магнитными свойствами соединений и на этой основе определять кристаллохимические критерии направленного поиска новых функциональных магнетиков, например, в базе данных неорганических кристаллических структур (ICSD). В настоящее время база ICSD включает в себя более 200 000 кристаллических структур. Среди рассмотренных нами соединений ключевыми являлись следующие материалы: сильно фрустрированные антиферромагнетики – спиновые жидкости [2-5]; магнетоэлектрики и мультиферроики [6-9]; хиральные магнитные солитоны [10-11]; стрейнтроники – 2D материалы, магнитное упорядочение которых легко настраивается через изменение кристаллической структуры под действием механической деформации. [12]

Поиск потенциальных материалов с реализацией квантовой спиновой жидкости является очень важной задачей для спинтроники. Считается, что фрустрация (конкуренция) магнитных взаимодействий является главным качеством, которым должны обладать кандидаты на квантовую спиновую жидкость. Согласно нашим расчетам и построению структурно-магнитных моделей, вулканические минералы Камчатки [4, 5] (пийпит $(\text{K}_4\text{Cu}_4\text{O}_2(\text{SO}_4)_4\text{MeCl})$, ключевскит $(\text{K}_3\text{Cu}_3(\text{Fe}_{0.82}\text{Al}_{0.18})\text{O}_2(\text{SO}_4)_4)$, камчаткит $(\text{KCu}_3\text{OCl}(\text{SO}_4)_2)$, аверьевит $(\text{Cu}_5\text{O}_2(\text{VO}_4)_2(\text{CuCl}))$, ильинскит $(\text{NaCu}_5\text{O}_2(\text{SeO}_3)_2\text{Cl}_3)$ и авдонинит $(\text{K}_2\text{Cu}_5\text{Cl}_8(\text{OH})_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O})$) состоят из антиферромагнитных спин-фрустрированных связанных вершинами Cu_4 -тетраэдров. Проведено прогнозирование новых сверхпроводящих материалов. Основные результаты этих исследований изложены в [13 – 15]. Во-вторых, установлена роль стереохимической активности неподеленной пары электронов непереходных элементов в строении их соединений и в возникновении переходов полупроводник-металл [16–18]. В-третьих, определена роль релятивистских эффектов в образовании многоатомных катионов ртути [19]. В-четвертых, установление факторов, определяющих синтез пленок заданного состава и структуры на титане и цирконии в условиях микроплазменных разрядов [20].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] L. M. Volkova and S. A. Polyshchuk. New Method to Calculate the Sign and Relative Strength of Magnetic Interactions in Low-Dimensional Systems on the Basis of Structural Data. *J. Supercond.* 18 (2005) 583 DOI: 10.1007/s10948-005-0043-9.
- [2] L. M. Volkova. Orthorhombic and triclinic modifications of the arsenate $\text{Cu}_4\text{O}(\text{AsO}_4)_2$ and isotypic phosphates $\text{Cu}_4\text{O}(\text{PO}_4)_2$: strongly frustrated antiferromagnetics. *Phys. Scr.* 98 (2023) 025824, <https://doi.org/10.1088/1402-4896/acb516>
- [3] L. M. Volkova and D. V. Marinin. Crystal chemistry criteria of the existence of spin liquids on the kagome lattice. *J. Phys.: Condens. Matter* 33 (2021) 415801, <https://doi.org/10.1088/1361-648X/ac145e>.
- [4] L. M. Volkova and D. V. Marinin. Antiferromagnetic spin-frustrated layers of corner-sharing Cu_4 tetrahedra on the kagome lattice in volcanic minerals $\text{Cu}_5\text{O}_2(\text{VO}_4)_2(\text{CuCl})$, $\text{NaCu}_5\text{O}_2(\text{SeO}_3)_2\text{Cl}_3$, and $\text{K}_2\text{Cu}_5\text{Cl}_8(\text{OH})_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. *J. Phys.: Condens. Matter* 30 (2018) 425801, <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aade0b>.
- [5] L. M. Volkova and D. V. Marinin. Spin-frustrated pyrochlore chains in the volcanic mineral kamchatkite $(\text{KCu}_3\text{OCl}(\text{SO}_4)_2)$. *Physics and Chemistry of Minerals* (2018) 45:655–668, <https://doi.org/10.1007/s00269-018-0950-5>
- [6] L. M. Volkova and D. V. Marinin. Crystal chemistry aspects of the magnetically induced ferroelectricity in TbMn_2O_5 and BiMn_2O_5 . *J. Phys.: Condens. Matter* 21 (2009) 015903, doi:10.1088/0953-8984/21/1/015903.
- [7] L. M. Volkova. Search of low-dimensional magnetism on the basis of structural data: spin-1/2 antiferromagnetic zigzag chain compounds In_2VO_5 , $\beta\text{-Sr}(\text{VOAsO}_4)_2$, $(\text{NH}_4\text{K})_2\text{VOF}_4$ and $\alpha\text{-ZnV}_3\text{O}_8$. *J. Phys.: Condens. Matter* 19 (2007) 176208 (15pp) doi:10.1088/0953-8984/19/17/176208
- [8] L. M. Volkova and D. V. Marinin. Crystal Chemistry Search of Multiferroics with the Stereochemically Active Lone Pair. *J Supercond Nov Magn* (2011) 24:1839–1845 DOI 10.1007/s10948-011-1132-6
- [9] L. M. Volkova and D. V. Marini. Magnetoelectric Ordering of BiFeO_3 from the Perspective of Crystal Chemistry. *J Supercond Nov Magn* (2011) 24:2161–2177 DOI 10.1007/s10948-011-1178-5
- [10] L. M. Volkova and D. V. Marinin. Possibility of Emergence of Chiral Magnetic Soliton in Hexagonal Metal Formate $[\text{NH}_4][\text{M}(\text{HCOO})_3]$ with $\text{M}^{2+} = \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{and Ni}$ and $\text{KCo}(\text{HCOO})_3$. *J Supercond Nov Magn* (2016) 29:2931–2945 DOI 10.1007/s10948-016-3588-x
- [11] L. M. Volkova and D. V. Marinin. Role of structural factors in formation of chiral magnetic soliton lattice in $\text{Cr}_1/3\text{NbS}_2$. *Journal of Applied Physics* 116, 133901 (2014) doi: 10.1063/1.4896950
- [12] L. M. Volkova. Structurally induced magnetic transitions in layered dichalcogenides MoQ_2 ($\text{Q} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) and double hydroxides $(\text{M}^{2+})_6\text{Al}_3(\text{OH})_{18}[\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ($\text{M}^{2+} = \text{Mn}^{2+}, \text{Fe}^{2+}$) under mechanical deformation. [arXiv:2410.00391](https://arxiv.org/abs/2410.00391) [cond-mat.mtrl-sci], <https://doi.org/10.48550/arXiv.2410.00391>
- [13] L. M. Volkova, S. A. Polyshchuk and F. E. Herbeck. Correlation of T_c with Crystal Chemical Parameters in High- T_c Cuprates, Diborides and Borocarbides: Concept of Arrangement and Function of Layered Superconductors. *Focus on Superconductivity*, ed Barry P. Martins (N.Y.: Nova Science Publisher Inc.) (2004) p.83-136.
- [14] L. M. Volkova and D. V. Marinin. Prediction of inorganic superconductors with quasi-one-dimensional crystal structure. *Supercond. Sci. Technol.* 26 (2013) 025015 (18pp) doi:10.1088/0953-2048/26/2/025015
- [15] L. M. Volkova. Crystal chemical simulation of superconductors on the basis of oxide and intermetallic layers. *Supercond. Sci. Technol.* 21 (2008) 095019 (5pp) doi:10.1088/0953-2048/21/9/095019
- [16] L. M. Volkova and A. A. Udovenko. Influence of electron lone pair on the structure and properties of As, Sb, and Bi compounds. (CHAPTER) *Problemy Kristalloghimii* - 1987. Moscow: "Nauka", 1988, 46-80.
- [17] A. A. Udovenko and L. M. Volkova. Crystallochemistry of antimony(III) compounds (Review). *Russian Journal of Coordination Chemistry* v.7, N12, 1763-1813 (1981)
- [18] L. M. Volkova, A. A. Udovenko, G. B. Bokij, V. Ja. Shevchenko, V. B. Lazarev, A. D. Izotov. Change of stereochemical activity of electron lone pairs and the transition semiconductor - metal in homologous series of nontransition elements. *Koordinatsionnaya khimiya* (Russian), 1983, v.9, N5, pp.609-614.
- [19] L. M. Volkova and S. A. Magarill. On formation of polyatomic mercury cations. *Journal of Structural Chemistry* 40(2), 262–269 (1999) <https://doi.org/10.1007/BF02903655>
- [20] Chisanofova O.A., Volkova L.M., Gnedenov C.V., Kaidalova T. A., Gordienko P. S.. Synthesis of films of chemical compounds on the titan in the conditions of microar plasma. *Zh. Neorganicheskoi khimii* (Russian), 1995, v.40, N4, 588-562.

Влияние вакуум-термических отжигов на структурные, электрические и оптические характеристики коммерческих образцов прозрачных проводящих оксидов ИТО и FTO

¹Ю.Н. Власов*, ¹А.В. Буданов, ¹Н.И. Репников, ²Е.В. Руднев, ²В.Е. Фролова,

²А.М. Чертолясов, ²Э.П. Домашевская

¹ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет инженерных технологий»,
пр. Революции, 19, Воронеж 394036, Российская Федерация

²ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»,
Университетская пл., 1, Воронеж 394018, Российская Федерация

*e-mail : youramail@mail.ru, +79038511095

Целью работы является определение влияния вакуум-термических отжигов на свойства коммерческих образцов, полученных магнетронным распылением ИТО и FTO на натриево-кальциевое флоат-стекло (SLG).

Актуальность исследования прозрачных проводящих покрытий на основе металлооксидных полупроводников ИТО ($\text{In}_2\text{O}_3:\text{Sn}$) и FTO ($\text{SnO}_2:\text{F}$) обусловлена их широким использованием в производстве оптоэлектронных приборов, солнечных элементов, сенсорных экранов, электрохромных панелей, элементов гибкой электроники и многих других устройств [1]. Экспериментальные результаты данной работы, полученные с использованием методов рентгеноспектрального микроанализа, сканирующей электронной микроскопии, рентгеновской дифракции, 4-х зондового метода и оптической спектроскопии, направлены на исследование проблемы стабильности фазового состава, электропроводящих и оптических свойств коммерческих образцов ИТО и FTO при высокотемпературных отжигах в интервале температур от 300°C до 500°C.

На основе сравнительного анализа структурных, электрических и оптических характеристик образцов ИТО и FTO сделаны выводы о том, что гарантировать стабильность близких по параметрам электрических и оптических характеристик (Рис.1) в двух исследованных материалах коммерческих образцов от компании Luoyang Guluo Glass Co., Ltd. можно до температур 300°C. При этом условии возможна замена более дорогого ИТО на FTO в практических приложениях и в производстве светоизлучающих и поглощающих свет устройствах.

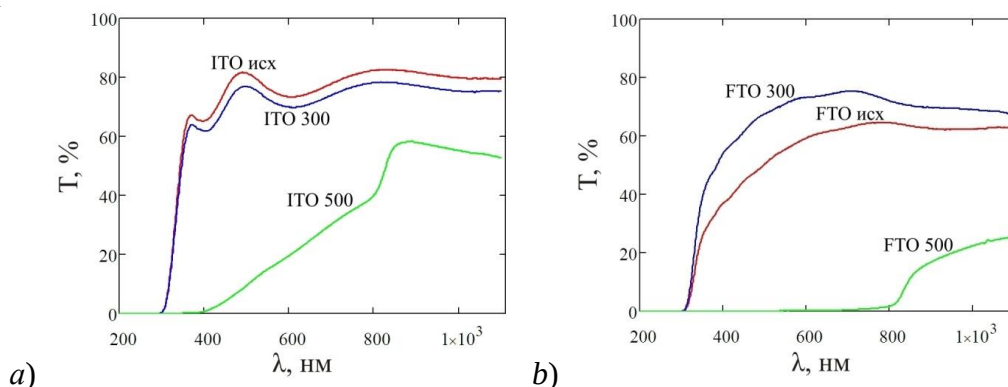


Рис.1. Оптические спектры пропускания образцов ИТО (a) и FTO (b).

Работа выполнена при частичной поддержке Минобрнауки РФ в рамках Госзадания для университетов в области научной деятельности, проект FZGU 2026-0009.

[1] Stadler, A. Transparent Conducting Oxides – An Up-To-Date Overview. *Materials* **2012**, 5, 661-683. <https://doi.org/10.3390/ma5040661>

Исследования фазового состава ионно-лучевых пленок Ta-Si методом ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии и рентгеновской рефлектометрии

Е.И. Гайворонская^{a,*}, М.И. Гайворонская^a, И.В. Польшин^a, Е.С. Керсновский^a, С.А. Ивков^a, Я.А. Пешков^a, А.И. Чукавин^{a,b}, Г.П. Потуданский^{a,c}, Н.В. Пермяков^a,
Н.А. Борщ^a, А.Е. Никонов^c, А.В. Ситников^c, К.А. Барков^a

^a ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия

^b УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, 426067 Россия

^c АО «РТ Лабс», г. Москва, 119415 Россия

^d Воронежский государственный технический университет, Воронеж, 394006 Россия

*e-mail: gaivoronskaya@phys.vsu.ru, +79202280930

В работе показаны возможности исследования фазового состава пленок Ta-Si с помощью взаимодополняющих методов ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС) и рентгеновской рефлектометрии.

В данной работе методом ионно-лучевого распыления составной мишени получены пленки Ta-Si с содержанием тантала в пленках от ~30 до 80 ат. %.

Анализ УМРЭС Si $L_{2,3}$ -спектров показал, что в пленках Ta-Si присутствуют характерные особенности силицидов тантала и оксидов кремния. Для идентификации фаз силицидов тантала спектры УМРЭС были рассчитаны из первых принципов в рамках теории функционала плотности для соединений TaSi, TaSi₂, Ta₅Si₃ и Ta₃Si. Исходя из сопоставления теоретических и экспериментальных УМРЭС спектров можно сказать, что в пленке с низким содержанием тантала ~30 ат. % присутствуют высшие силициды тантала. Увеличении содержания тантала до ~80 ат. % приводит к изменению спектров в пользу низших силицидов.

По результатам рентгеновской рефлектометрии была определена плотность пленок Ta-Si. Из рисунка 1 видна тенденция увеличения плотности от 9,67 до 13,18 г/см³ с увеличением содержания тантала. В случае образцов с высоким содержанием тантала, полученные значения плотности пленок Ta-Si несколько ниже по сравнению с объемными фазами низших силицидов, что характерно для аморфных пленок. При этом в пленках с низким содержанием тантала плотность выше чем в силициде TaSi₂, что может быть связано с присутствием нескольких фаз силицидов в пленке.

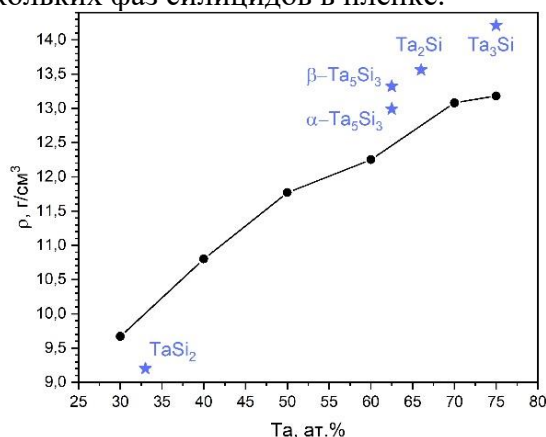


Рис. 1. Зависимость плотности пленок Ta-Si от содержания Ta в пленке, а также эталонные плотности фаз силицидов тантала TaSi₂, α- и β-Ta₅Si₃, Ta₂Si и Ta₃Si из баз данных Springer Materials и Materials Project

Анализ формирования фазы Mo_5Si_3 в пленке Mo-Si по данным ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии и рентгеновской рефлектометрии

М.И. Гайворонская ^{a*}, Е.И. Гайворонская ^a, И.В. Польшин ^a, Е.С. Керсновский ^a, С.А. Ивков ^a, Я.А. Пешков ^a, А.И. Чукавин ^{a,б}, Г.П. Потуданский ^{a,в}, Н.В. Пермяков ^a, Н.А. Борщ ^a, А.Е. Никонов ^г, А.В. Ситников ^г, К.А. Барков ^a

^a Воронежский государственный университет, Воронеж, Университетская пл. 1

^б УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск, ул. Татьяны Барамзиной, 34

^в АО «РТ Лабс», г. Москва, пр. Вернадского, 41

^г Воронежский государственный технический университет, Воронеж, ул. 20-летия Октября, 84

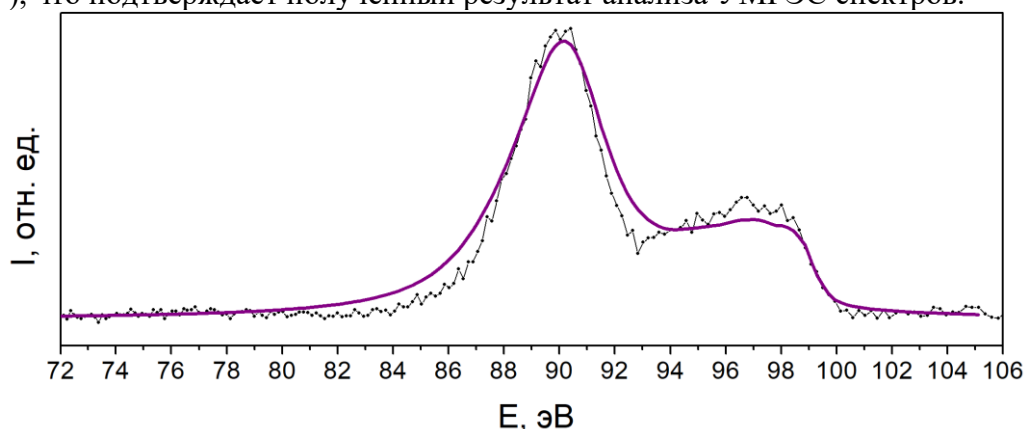
*e-mail: mig2.3mari@gmail.com, +79202284280

В данной работе представлены результаты комплексных исследований фазового состава пленки Mo-Si с использованием методов ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС) и рентгеновской рефлектометрии.

Была получена пленка Mo-Si с атомным составом $\text{Mo}_{65}\text{Si}_{35}$ методом ионно-лучевого распыления составной мишени.

Спектры УМРЭС пленки $\text{Mo}_{65}\text{Si}_{35}$, полученные на глубине анализа 10 нм показали, что основа пленки сформирована фазой Mo_5Si_3 , с небольшим окислением кремния (~10% SiO_2), что хорошо коррелирует с результатами работы [1]. На глубине 20 нм пленка представляет собой только фазу Mo_5Si_3 . Экспериментальный УМРЭС спектр пленки $\text{Mo}_{65}\text{Si}_{35}$ хорошо согласуется с теоретически рассчитанным в рамках теории функционала плотности спектром фазы Mo_5Si_3 .

По данным рентгеновской рефлектометрии была получена плотность (8.11 г/см^3) тонкой пленки $\text{Mo}_{65}\text{Si}_{35}$, которая соотносится с табличными данными плотности для фазы Mo_5Si_3 (8.19 г/см^3), что подтверждает полученный результат анализа УМРЭС спектров.



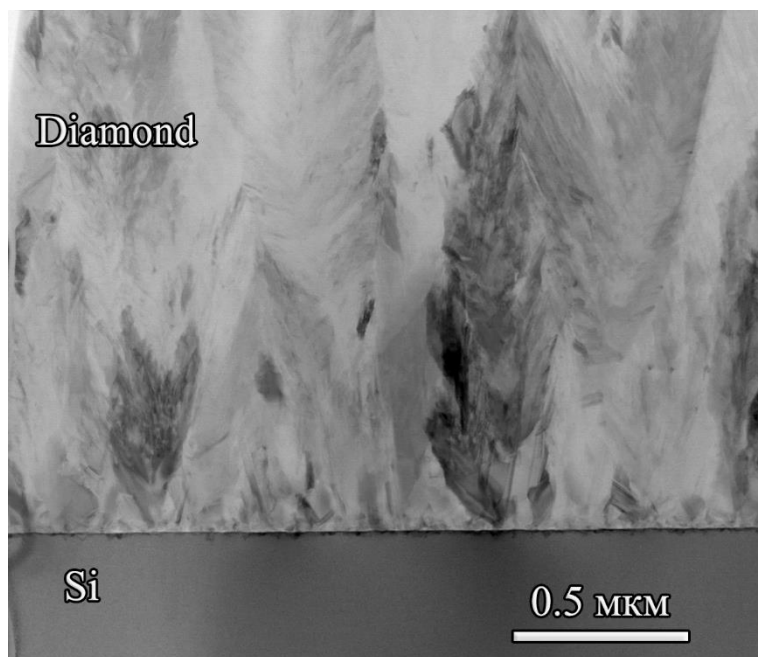
Рентгеновский эмиссионный Si $L_{2,3}$ пленки $\text{Mo}_{65}\text{Si}_{35}$ (точки) и рассчитанный спектр фазы Mo_5Si_3 (сплошная линия).

Miyata N. et al. Buried Interfaces of Heat-Loaded Mo/Si Multilayers Studied by Soft-X-Ray Emission Spectroscopy //Surf. УДК 666.3

Исследование алмазоподобных пленок на кремнии

М. В. Попов¹, В. В. Артемов², А.Л.Головин², А. Л. Васильев^{2*}¹Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН (ФИАН): г. Москва, Ленинский проспект, д. 53.²КК «Кристаллография и фотоника НИЦ «Курчатовский институт» Москва, 123182 Россия*e-mail: a.vasiliev56@gmail.com, +79104130115

Методом химического осаждения из газовой фазы в СВЧ плазме синтезированы нанокристаллические алмазные пленки в смеси с фазой аморфного углерода на подложке монокристаллического кремния. Пленки изучались методами просвечивающей (ПЭМ), просвечивающей растровой электронной микроскопии (ПРЭМ), электронной дифракции и рентгенофазового анализ (РФА). Светлопольное ПРЭМ изображение поперечного среза пленки представлено на Рис. 1. Обнаружено, что пленка состоит из колончатых



дендритоподобных зерен поперечным размером до 0.5 мкм с высокой плотностью дефектов, по-видимому, дефектов упаковки. На границе раздела пленка-подложка проявляется промежуточный аморфный слой толщиной около 1 нм. Вблизи границы раздела располагаются кристаллиты неправильной формы размерами около 20 нм

Рис. 1. Светлопольное ПРЭМ изображение поперечного среза пленки.

Рентгенофазовый анализ (Рис. 2) в подтверждает наличие частиц алмаза. На дифрактограмме видны рефлексы при $2\theta = 43,9^\circ$ - 111

– отражение и $2\theta = 75,3^\circ$ - 220, что соответствует алмазу (Пространственная группа Fd-3m) с параметром решетки $a=3,57 \text{ \AA}$. Пик от подложки Si $2\theta = 69,15^\circ$ соответствует 400 (CuK α 1) отражению Si (Fd-3m, $a=5,43 \text{ \AA}$). Наличие большого по интенсивности диффузного рассеяния в диапазоне углов $2\theta = 15 - 40^\circ$ свидетельствует о высокой дефектности или об аморфизации.

Работа в части электронно-микроскопических и рентгенофазовых исследований проводилась в рамках Госзадания НИЦ «Курчатовский институт».

Композитные биоматериалы на основе конденсированных фосфатов кальция для тканевой инженерии костной ткани

Д. О. Голубчиков^{а,б*}, П. В. Евдокимов^{а,б}, В. И. Путляев^{а,б}

^а Факультет наук о материалах, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, 119192 Россия

^б Химический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, 119192 Россия

*e-mail: golubchikovdo@my.msu.ru, +74959392469

Глобальное старение населения обуславливает непрерывное увеличение количества травм и иных повреждений целостности костей, требующих оперативного лечения. Создание перспективных остеопластических материалов опирается на принцип физиологической регенерации, подразумевающий их интеграцию в естественный цикл ремоделирования кости для достижения ее полного восстановления.

Ключевыми критериями при оценке эффективности биodeградируемых композитов выступают их прочностные характеристики и динамика растворения. Помимо обеспечения структурной поддержки и высокой биосовместимости, современные матрицы для имплантации должны стимулировать прорастание сосудов, активизировать метаболические процессы и ускорять остеогенез

Биокерамика на основе фосфатов кальция занимает лидирующие позиции среди материалов для тканевой инженерии костной ткани. Тем не менее, широко используемые гидроксиапатит и трикальцийфосфат, как правило, имеют низкую скорость биорезорбции. В данном исследовании предлагается подход к повышению скорости биорезорбции кальцийфосфатных материалов путем варьирования соотношения Са/Р в керамических композитах для управления растворимостью, а также с целью дальнейшего их дальнейшего введения в качестве наполнителя в композиты с матрицей из термопластичного полимера.

В ходе данной работы были оптимизированы подходы к синтезу чистых фаз-прекурсоров, в частности, полифосфата кальция и аморфного фосфата кальция [1], что обеспечивало целевое соотношение Са/Р в полученных бифазных образцах. Температуры синтеза полифосфата кальция были выбраны на основе данных термогравиметрии/дифференциальной сканирующей калориметрии. Кроме того, были отработаны различные режимы спекания бифазной керамики, приводящие к образованию плотных компактов модельной геометрии, оценка применимости которых осуществлялась посредством термодилатометрии. Стоит отметить, что полифосфат кальция может дополнительно выступать в качестве спекающей добавки, обеспечивая спекание в расплаве. Также было изучено влияние рН на скорость растворения разработанной бифазной керамики. Более того, было изучено влияние состава керамики (соотношение Са/Р) на механические свойства.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 22-19-00219-П.

Исследование стабильной работы мембранного элемента (МЭ) с мембраной из сплава (Pd-8,3ат. %Sm) в продуктах плазмохимического пиролиза метана

С. В. Горбунов*, В. С. Касьянов, В. А. Дементьев

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук (ИМЕТ РАН), Москва, Россия

*e-mail: Merciles@mail.ru, +7 (499) 135-94-86

Извлечение водорода из водородосодержащих газовых смесей с помощью мембран из сплавов палладия является единственным, известным на сегодняшний день, способом получения водорода чистотой $\geq 99,9999$ об.%, реализуемым в одну стадию при наименьших энергетических и эксплуатационных затратах, и рассматривается среди самых перспективных технологий за счет наивысших селективности и скорости извлечения водорода.

Актуальность работ по разработке сплавов палладия и мембран из них, эффективно и стабильно работающих в процессе селективного выделения высокочистого водорода, определяется потребностью в высокочистом водороде в качестве топлива в топливных элементах, микро- и нанoeлектронике, волоконной оптике и т.д. Важнейшими характеристиками палладиевых мембран является скорость проникновения водорода через мембрану, их прочность и стойкость при эксплуатации. Значительное увеличение водородопроницаемости и прочности наблюдается у сплавов, легированных редкоземельными металлами (РЗМ) [1].

Целью данной работы было исследование работоспособности МЭ с мембраной из сплава (Pd-8,3ат. %Sm) в газовой смеси ($92\text{об. \%H}_2 + 6\text{об. \%CH}_4 + 2\text{об. \%C}_2\text{H}_4$) идентичной продуктам плазмохимического пиролиза метана.

Предварительные исследования показали, что он обладает следующими физико-химическими и механическими характеристиками: $H_v = 1600$ МПа; $\sigma_v = 870$ МПа; $\delta = 27\%$; $Q = 3,03 \frac{\text{нм}^3 \cdot \text{мм}}{\text{м}^2 \cdot \text{ч} \cdot \text{МПа}^{0,5}}$ при температуре 500 °С.

В работе использовалась конструкция МЭ, исключая сварные соединения.

Исследование водородопроницаемости и производительности в процессе работы проводили на испытательном стенде с использованием высокотемпературной рабочей камеры, в которую помещали мембранный элемент. Методика исследования водородопроницаемости приведена в работе [2].

Мембранный элемент был испытан в газовой смеси ($92\text{об. \%H}_2 + 6\text{об. \%CH}_4 + 2\text{об. \%C}_2\text{H}_4$) в течение 80 часов. Производительность по чистому водороду при рабочих параметрах (500 °С, $P_{\text{вх}}=10$ атм, $P_{\text{вых}}=1$ атм) в течение всего времени была стабильной и составила 0,2 м³/ч.

1. S. Yun, S. T. Oyama, Correlations in palladium membranes for hydrogen separation: A review, Journal of Membrane Science 375 (2011) 28–45.

2. Gorbunov S.V., Kannykin S.V., Penkina T.N., Roshan N.R., Chustov E.M., Burchanov G.S. Palladium–Lead Alloys for the Purification of Hydrogen-Containing Gas 15 Mixtures and the Separation of Hydrogen from Them // Russian Metallurgy (Metally) 2017. No. 1. P. 54–59. DOI: 10.1134/S0036029517010050.

О. М. Губанов*

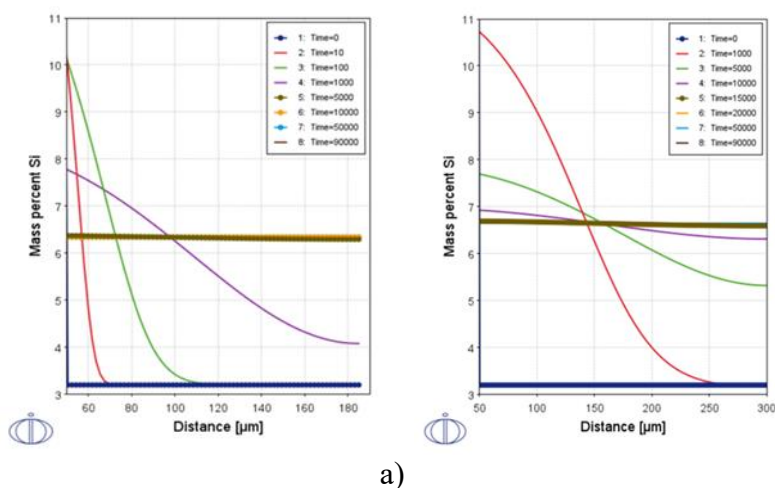
ООО «НИЦ Алюм», Московская обл., г.о. Красногорск, с. Ангелово, 143442 Россия

*e-mail: gubanov_oleg81@mail.ru, +79205025995

В работе произведено математическое моделирование процессов насыщения электротехнической стали кремнием с поверхности для различных толщин подложки, температур и составов насыщающих смесей. Моделирование производилось при помощи диффузионного модуля DICTRA программы Thermo-Calc на стандартной базе данных по термодинамике и свойствам материала и было основано на решении уравнений многокомпонентной диффузии.

По результатам моделирования показано, что снижение толщины подложки полосы эффективно ускоряет процесс насыщения кремнием. Общее содержание кремния в насыщающем слое практически не влияет на скорость процесса, но при его повышении обеспечивает получение большего содержания кремния в стали по результатам гомогенизации по всему сечению подложки.

Выявлено, что скорость насыщения сильно зависит от температуры процесса и при ее снижении ниже некоторого порогового значения не происходит гомогенизации хим. состава в диапазоне выдержек, используемых при промышленном отжиге [1].



Модель насыщения стали при температуре 1150°C для различных толщин подложки и содержания Si в насыщающей смеси: а) 0,27 мм и 18%, б) 0,5 мм и 27%

Общее содержание кремния в стали с получением требуемого уровня до 6,5% наиболее целесообразно регулировать содержанием кремния в силицирующем слое, а глубину и однородность насыщения – температурой отжига, что позволит избежать сегрегации кремния в локальных областях и получения железокремнистых соединений.

Полученные данные позволяют планировать промышленную отработку технологии насыщения электротехнических сталей в конечной толщине с использованием различных типов нагревательных печей и эффективно управлять процессом по получению новых классов сталей, как с гомогенным, так и с градиентным содержанием кремния.

[1] Aldareguiaa J.M., Garcia-Rosales C., Sevillano J.G. Si enrichment of conventional electrical steel by means of physical vapour deposition // Scripta Materialia. 1999. Vol. 41. No. 7. pp. 729–735. DOI: 10.1016/S1359-6462(99)00208-0

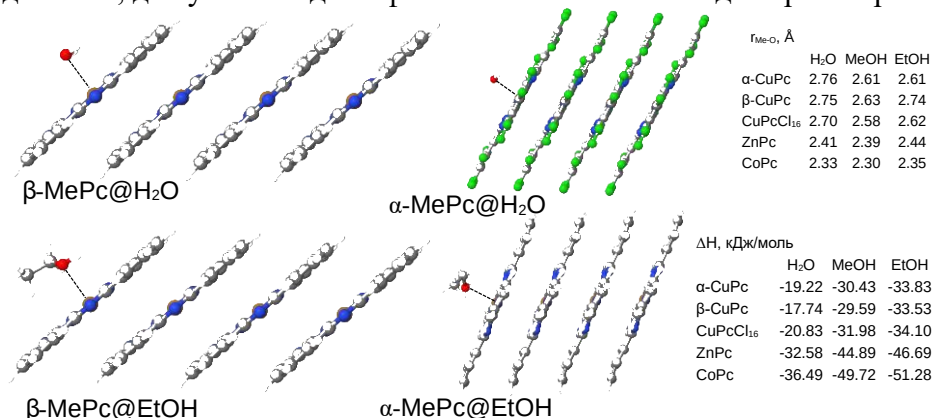
А.А. Дегтярев*, А.В. Тришина, Т.П. Дьячкова, И.В. Гутник, Н.А. Чапаксов

ФГБОУ ВО Тамбовский государственный технический университет, Тамбов, Россия

*e-mail: ad.dycost@gmail.com, +79606608293

В работе исследованы механизмы образования и термодинамические характеристики комплексов металлофталоцианинов (MePc) с водой, метанолом и этанолом с использованием теории функционала плотности (DFT). Фрагмент поверхности MePc представлялся в виде молекулярного кластера, соответствующего экспериментальной геометрии кристаллической фазы. В качестве исследуемых фталоцианинов были приняты две α -модификации: фталоцианин меди (α -CuPc), хлорированный фталоцианин меди (CuPcCl_{16}) и три β -модификации: фталоцианин меди (β -CuPc), фталоцианины цинка и кобальта (ZnPc, CoPc).

В качестве расчетного метода был принят композитный $r^2\text{SCAN-3c}$ [1]. Т.к. наибольший интерес представляет образование комплексов MePc@Sorbate на интерфейсе жидкость-твердое тело, для учета жидкой фазы использовалась модель растворителя SMD [2].



Структура комплексов воды и этанола с торцевой поверхностью кластеров MePc.

Были получены комплексы на торцевой и боковых поверхностях кластера. Для α -модификаций обе боковые поверхности идентичны, для β -модификаций различны. Параметры сорбции для торцевой поверхности приведены на рис. выше. Для боковых поверхностей наблюдались следующие закономерности:

- для β -модификаций энтальпия образования комплекса практически не зависит от металла, -19 и -16 кДж/моль для воды, -29 и -22 кДж/моль для метанола, -30 и -24 кДж/моль для этанола;
- для α -CuPc энтальпии равны -17 кДж/моль (вода), -26 кДж/моль (метанол) и -29 кДж/моль (этанол);
- для CuPcCl_{16} энтальпии равны -15 кДж/моль (вода), -13 кДж/моль (метанол) и -17 кДж/моль (этанол).

1. Grimme S., Hansen A., Ehlert S., Mewes J. M. // J. Chem. Phys. 2021. V. 154. P. 064103. doi: 10.1063/5.0040021

2. Marenich A. V., Cramer C.J., Truhlar D. G. // J. Phys. Chem. B. 2009. V. 113. P. 6378–6396. doi: 10.1021/jp810292n

Туннельное магнитосопротивление в магнитоупорядоченных нанокompозитах $\text{Fe}_x(\text{ZrO}_2)_{100-x}$ с избыточным содержанием кислорода

Дерябин. А.М., Стогней О.В., Ситников А.В., Макагонов В.А.

Воронежский государственный технический университет, Воронеж

andrey.derabin@gmail.com

Исследовано влияние избыточного кислорода на магнитные и магниторезистивные свойства двух партий нанокompозитов $\text{Fe}_x(\text{ZrO}_2)_{100-x}$ в широком диапазоне концентрации металлической фазы ($21 \leq x$, ат. % ≤ 45). Образцы получены методом ионно-лучевого распыления составной мишени в смешанной газовой среде ($\text{Ar} + \text{O}_2$), с разным парциальным давлением кислорода. В качестве параметра, отражающего избыточность кислорода в композите, выбрано отношение измеренной концентрации кислорода и циркония ($C_{\text{O}}/C_{\text{Zr}}$). Для стехиометричного ZrO_2 такое отношение равно двум, в исследованных партиях данное отношение равно 4,28 и 5,3.

Установлено, что в полученных композитах $\text{Fe}_x(\text{ZrO}_2)_{100-x}$ наблюдается магниторезистивный эффект (рис. 1) с одновременным проявлением макроскопического ферромагнетизма с большими значениями коэрцитивной силы (рис. 2, 3).

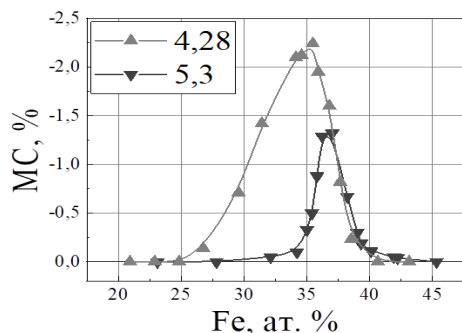


Рис. 1 Концентрационная зависимость магнитосопротивления нанокompозитов $\text{Fe}_x(\text{ZrO}_2)_{100-x}$. Значение $C_{\text{O}}/C_{\text{Zr}}$ приведено на вставке

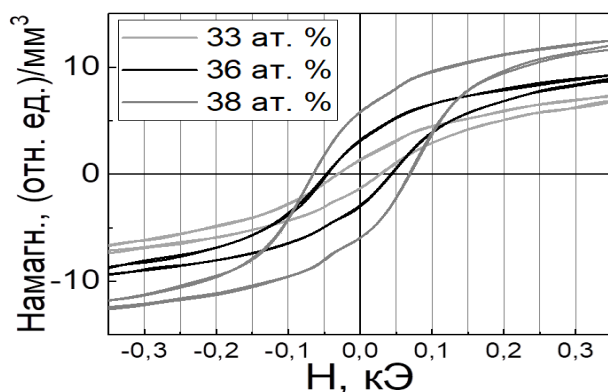


Рис. 2 Петли магнитного гистерезиса нанокompозитов $\text{Fe}_x(\text{ZrO}_2)_{100-x}$ с $C_{\text{O}}/C_{\text{Zr}}=4,28$. Концентрация железа приведена на вставке

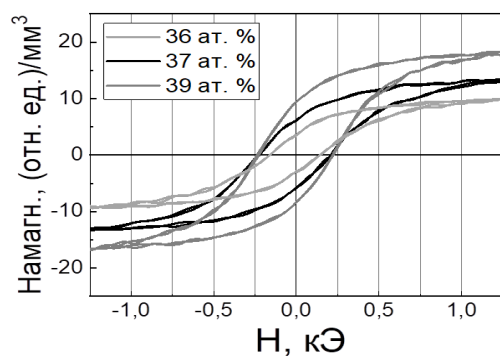


Рис. 3 Петли магнитного гистерезиса нанокompозитов $\text{Fe}_x(\text{ZrO}_2)_{100-x}$ с $C_{\text{O}}/C_{\text{Zr}}=5,3$. Концентрация железа приведена на вставке

В «классическом» случае металл-диэлектрического нанокompозита появление ферромагнетизма означает формирование макродоменов и сонаправленную ориентацию спинов металлических наногранул, что делает туннельный магниторезистивный эффект невозможным. Однако, в нашем случае, избыточный кислород приводит к частичному окислению наногранул железа и образованию вюститной (FeO) оболочки. Нанокристаллический вюстит может проявлять ферромагнитные свойства, и мы полагаем, что петли магнитного гистерезиса связаны именно с этой фазой. Магнитные моменты неокисленных «сердцевин» гранул остаются нескоррелированными, что объясняет наличие магниторезистивного эффекта. Важно, что несмотря на наличие магнитного гистерезиса, гистерезис магнитосопротивления отсутствует, что подтверждает отсутствие корреляции между моментами гранул железа.

Возрастание избыточного кислорода приводит к увеличению ширины непроводящего барьера между гранулами железа за счёт формирования оболочки вюстита (полупроводник p-типа). Вследствие этого снижается величина магниторезистивного эффекта и сужается концентрационный интервал его проявления (рис. 1). Увеличение объемной доли вюстита приводит к возрастанию коэрцитивной силы композитов примерно в два раза (рис. 2, 3).

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта FZGM-2026-0003.

С. В. Добрыдень^{1,*}, Я. Р. Беспалова¹, В. И. Васильева¹, Э. М. Акберова^{1,2}¹ ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», Воронеж, 394018 Россия² ФГКВОУ ВПО «Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», Воронеж, 394064 Россия

*e-mail: dobryden@chem.vsu.ru

Физико-химические и транспортные характеристики, оказывающие влияние на поведение мембран при эксплуатации, определяются их структурными особенностями. Объектами исследования выступали мембраны МА-41 с содержанием анионообменной смолы 55, 60 и 69 масс. %. В отличие от выпускаемых на ООО «ИП «Щекиноазот» (Россия) коммерческих мембран МА-41 с содержанием 60 масс. % и диаметром частиц помола ионообменной смолы $2R < 56$ мкм в исследуемых мембранах размер частиц смолы составлял $2R < 20$ мкм. Для визуализации и количественной оценки структурных характеристик поверхности набухших образцов мембран применяли метод растровой электронной микроскопии (РЭМ) на микроскопе JSM-6380 LV (JEOL, Япония). Для количественной оценки доли, размеров ионообменников и макропор использовался авторский программный комплекс, предложенный в [1].

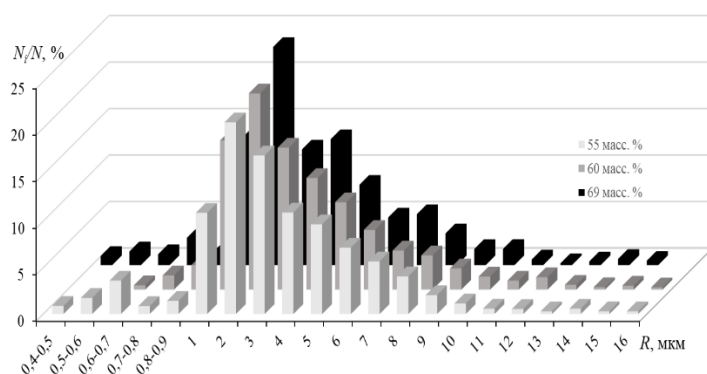


Рис. 1. Гистограммы распределения ионообменников по радиусам на поверхности образцов мембран с разной долей ионообменника

Установлено, что при увеличении содержания ионообменной смолы от 55 до 69 % масс. % доля проводящей фазы на поверхности мембраны МА-41 увеличивается на 30 %, что сопровождается ростом пористости в 2,7 раз.

Распределение частиц ионообменной смолы по радиусам на поверхности мембран представлено на рис. 1. Средневзвешенный радиус частиц ионообменной смолы на поверхности и пор исследуемых образцов экспериментальных мембран составил 3,5 мкм и 1,6-1,7 мкм, соответственно.

[1] Е.А. Сирота, Н.А. Кранина, В.И. Васильева, М.Д. Малыхин, В.Ф. Селеменев. Вестник Воронеж. гос. ун-та. Сер. Химия. Биология. Фармация, 2011, 2, 53-59.

Результаты исследований частично получены на оборудовании Центра коллективного пользования Воронежского государственного университета. URL: <https://ckp.vsu.ru>.

А. И. Донцов^{а,б}^а ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия^б ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Воронеж, 394006 Россия*e-mail: dontalex@mail.ru, +74732208735

Сплавы Pd–Cu с упорядочением по типу В2 (структура CsCl) перспективны для мембран глубокой очистки водорода благодаря низкой энергии активации диффузии H₂ в упорядоченном состоянии (0,035 эВ против 0,23 эВ в неупорядоченной α -фазе), отсутствию гидридизации и значительному изменению электросопротивления при фазовом переходе $\alpha \leftrightarrow \beta$. В работе на основе совокупности экспериментальных данных и кристаллохимического анализа предложена детальная модель зарождения β -фазы на атомном уровне.

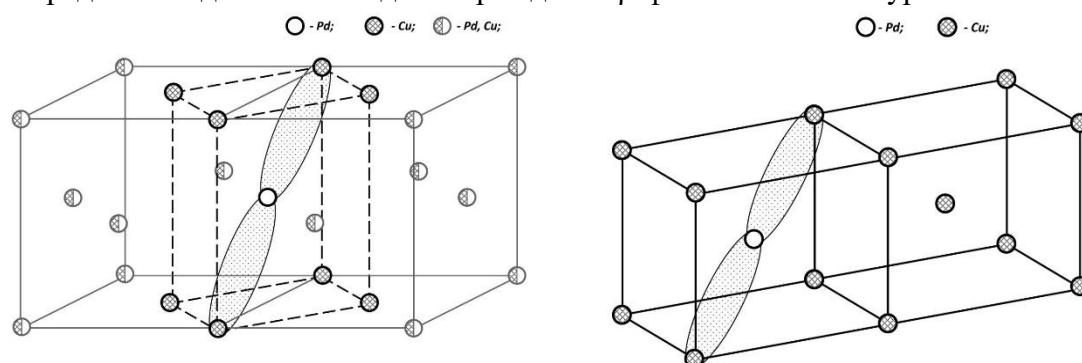


Рис. Модель превращения структурных единиц ОЦТ→ОЦК: а – «предзародыш» (атом Pd в центре ОЦТ-окружения из Cu); б – элементарная ячейка структуры CsCl и когерентно сопряжённая с ней ячейка ОЦК Cu (показана штриховкой).

Кристаллохимический критерий для электронных систем для эквиатомного состава близок к 1,5 (для 53 ат.% Cu–Pd $K = 1,47$), что обосновывает возможность упорядочения. Элементарный акт $\alpha \rightarrow \beta$ превращения по модели Бейна заключается в образовании в α -матрице «предзародышей» – кубических ячеек с атомом Pd в центре и восемью атомами Cu по вершинам (рис). Выбор Pd в центре обусловлен его большим радиусом (137 пм против 128 пм у Cu). Скорость превращения возрастает с увеличением содержания меди, так как повышается вероятность формирования таких предзародышей. Напротив, при составе, близком к эквиатомному (51 ат.% Cu–Pd), упорядочение практически подавляется из-за пространственного расслоения компонентов, что снижает коэффициент взаимной диффузии в 2,6 раза и уменьшает число центров зарождения. При избытке Cu (63,6 ат.%) формируется полностью упорядоченная структура CsCl, причём избыточные атомы меди могут заполнять вакантные позиции палладия, образуя структурные единицы ОЦК Cu, которые когерентно сопряжены с ячейками CsCl (рис). Эти структурные перестройки объясняют наблюдаемые эффекты изменения электропроводности и водородопроницаемости: в эквиатомных областях с избытком Pd диффузия водорода задерживается на наноразмерных неоднородностях, тогда как в обогащённых медью зонах процесс ускоряется. Предложенный механизм позволяет целенаправленно управлять кинетикой упорядочения через состав и термомеханическую обработку, что открывает пути для оптимизации мембранных материалов.

Диффузионное легирование титаната стронция барием

А.И. Бочаров, Н.А. Толстых, И.С. Ефимцев*, Л. Н. Коротков

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Воронеж,
394006 Россия

*e-mail: l_korotkov@mail.ru

Титанат стронция (SrTiO_3) – известный виртуальный параэлектрик, сегнетоэлектрический фазовый переход в котором подавляется сильными квантовыми флуктуациями [1]. Однако твердые растворы титаната стронция - титаната бария являются сегнетоэлектриками, которые широко применяются в технике СВЧ.

В работе исследованы закономерности формирования сегнетоэлектрических слоёв на поверхности титаната стронция SrTiO_3 методом диффузионного легирования барием.

Для эксперимента использовали подложки из монокристаллического титаната стронция. Диффузионное легирование барием осуществлялось из порошковых источников — титаната бария и карбоната бария, размещенных вблизи подложки в полугерметичном тигле. Процесс проводили при температурах 1250 – 1450 °С в течение 1 – 3 ч в атмосфере воздуха.

Микроструктуру образцов и элементный состав изучали с помощью сканирующего электронного микроскопа Tescan MIRA 3 с энергодисперсионным спектрометром Oxford х-аст.

Профили распределения основных и примесных атомов в монокристалле SrTiO_3 , полученные после диффузии Ва при температуре 1350 °С показаны на рисунке.

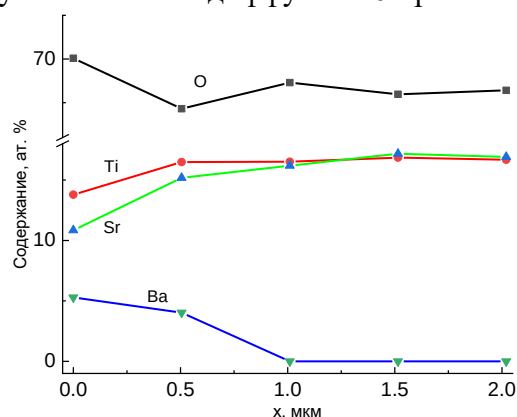


Рис. Распределение атомов Ba, Sr, Ti и O в монокристалле SrTiO_3 в результате диффузии бария при температуре 1350 °С.

Анализ полученных данных показал, что вблизи поверхности образца наблюдается дефицит атомов титана, который уменьшается в глубине образца. Суммарная концентрация атомов Ba и Sr в приповерхностном слое также несколько ниже стехиометрического значения. Результаты эксперимента обсуждаются.

1. Смоленский Г.А., Боков В.А., Исупов В.А. и др. Физика сегнетоэлектрических явлений / Под ред. Г.А. Смоленского. Л.: Наука. 1985. 396 с.

Влияние интенсивной механической обработки на кристаллическую структуру и магнитные свойства ультрадисперсного титаната стронция

Е. В. Иевлева^{а,*} Н.А. Толстых^а, Л.Н. Коротков^а
Ch. Li^б, Б. К. Абдулвахидов^б, К.Г. Абдулвахидов^б

^а ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Воронеж,
394006 Россия

^б Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, 344006 Россия

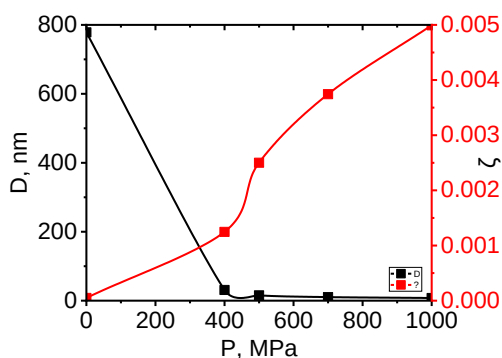
*e-mail: elenaz.86@mail.ru, +79601113824

Изучены закономерности влияния силового воздействия в сочетании со сдвиговой деформацией (СВСД) на структуру и магнитные свойства ультрадисперсного титаната стронция (SrTiO_3) – квантового параэлектрика, широко используемого в устройствах техники СВЧ. Исходный материал синтезировали по стандартной керамической технологии. Часть его подвергали дополнительной механической обработке, сочетающей силовое воздействие со сдвиговой деформацией, с использованием наковален Бриджмена из карбида вольфрама под давлением $P = 150 - 1000$ МПа в течение 40 мин.

Рентгенофазный анализ, проведенный при комнатной температуре с применением рентгеновского дифрактометра D2 Phaser, показал, что полученный материал при комнатной температуре обладает кубической кристаллической решеткой ($Pm-3m$).

Исследования магнитных свойств материала проводили при комнатной температуре с использованием вибрационного магнетометра LakeShore 7404 в полях напряженностью до ± 10 kOe.

Установлено, что симметрия решетки не меняется в результате силового воздействия, однако размеры области когерентного рассеяния (D) и микродеформации (ζ) заметно зависят от давления (P), прикладываемого к наковальням в ходе СВСД (рис).



Зависимости размеров области когерентного рассеивания D и микродеформаций ζ от давления P , прикладываемого в ходе СДСВ.

Магнитный отклик ультрадисперсного SrTiO_3 в отличие от объемного материала, который является диамагнетиком, содержит как диамагнитную, так и ферромагнитную составляющие. Обе они возрастают в результате силового механического воздействия из-за образования дефектов кристаллической решетки, приводящих к частичному восстановлению катионов Ti^{4+} [1]. Полученные в эксперименте зависимости намагниченности насыщения и диамагнитной восприимчивости от давления P не являются монотонными.

1. K. Siemek, A. Olejniczak, L.N. Korotkov, P. Konieczny, A.V. Belushkin //Applied Surface Science. 2022. V. 578. P. 151807.

Моделирование структуры и расчёт фононной теплопроводности алмазоподобного углерода (DLC) с примесными атомами кобальта методом молекулярной динамики

И. А. Зур^{а,*}, Ю. А. Федотова^а

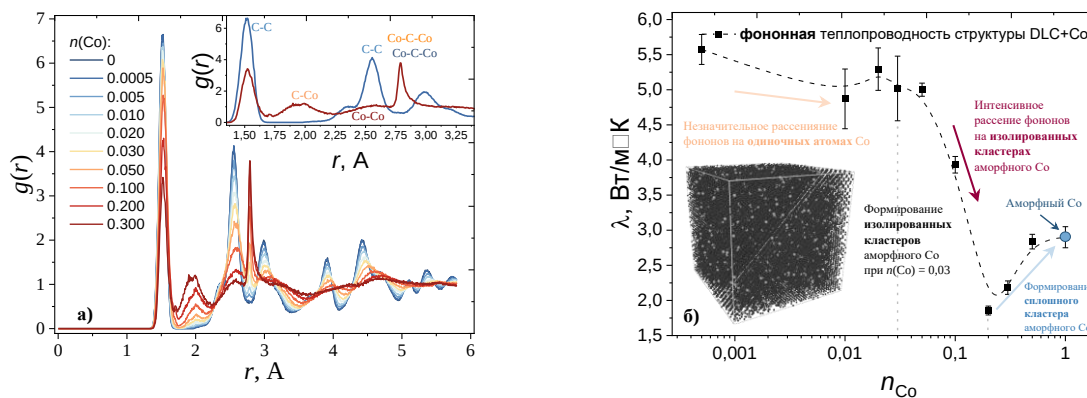
^а Научно-исследовательское учреждение "Институт ядерных проблем" Белорусского государственного университета, Минск, 220006, Беларусь

*e-mail: zur.ilya01@gmail.com, +375259697091

В работе представлены результаты моделирования структуры и расчёта фононной теплопроводности алмазоподобного углерода DLC с примесными атомами кобальта (Co) при температуре $T = 300$ К методом равновесной молекулярной динамики в программном пакете LAMMPS. Ансамбль состоит из $\approx 60 \cdot 10^3$ атомов C и Co, силовое взаимодействие которых определяется модифицированным потенциалом Терсоффа CCoW.tersoff. Основной расчёт длительностью 400 пс производился после предварительной релаксации структуры в микроканоническом ансамбле (NVE) с шагом интегрирования уравнений движения атомов $2,5 \cdot 10^{-4}$ пс.

По мере увеличения атомной концентрации Co n_{Co} от $5 \cdot 10^{-4}$ до $3 \cdot 10^{-1}$ в радиальной функции распределения $g(r)$ для структуры DLC + Co наблюдаются качественные изменения (см. Рис. 1а): (i) уменьшается интенсивность линий C–C с центрами $\approx 1,54$ Å и $\approx 2,52$ Å, (ii) растёт интенсивность линий C–Co с центрами $\approx 1,91$ и $\approx 2,79$ Å, что указывает на формирование метастабильного карбида Co_2C со структурой гидрофилита, (iii) возрастает интенсивность линий Co–Co ($\approx 2,52$ и $\approx 2,83$ Å), что интерпретируется как следствие образования кластеров Co.

Зависимость фононной теплопроводности $\lambda(n_{Co})$ структуры DLC + Co при 300 К (рис. 1б) имеет три характерных участка. При увеличении n_{Co} до 0,03 теплопроводность слабо снижается до $\approx 5,1$ Вт/м·К. В диапазоне $n_{Co} \approx 0,03$ –0,2 формируются изолированные кластеры Co, что усиливает рассеяние фононов и приводит к более резкому падению λ до $\approx 1,7$ Вт/м·К. При $n_{Co} > 0,2$ наблюдается смена характера зависимости: λ начинает возрастать и достигает $\approx 2,7$ Вт/м·К, что соответствует формированию связанного аморфного кластера Co.



а) Радиальная функция распределения $g(r)$ структуры DLC + Co с концентрацией $n(Co)$ 0,0005–0,3 при 300 К и б) зависимость фононной теплопроводности λ структуры DLC + Co от концентрации Co n_{Co} при $T = 300$ К

Установленные закономерности влияния атомной структуры и концентрации атомов Co на фононную теплопроводность структуры DLC + Co представляют интерес для приложений микро- и наноэлектроники, спинтроники, трибологии и разработки функциональных покрытий с регулируемыми тепловыми свойствами.

Прямой магнитоэлектрический эффект в кольцевом композите Fe-Ni / PZT

А. В. Калгин^{а,б}, Б. М. Даринский^{б,*}

^а ФГБОУ ВО Воронежский государственный технический университет, Воронеж,
394006 Россия

^б ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», Воронеж,
394018 Россия

*e-mail: darinskii@mail.ru, +79056514332

Слоистые магнитоэлектрические (МЭ) композиты ферромагнетик–пьезоэлектрик перспективны для устройств новой электроники. Однако для достижения максимума МЭ-отклика обычно требуется внешнее постоянное магнитное поле смещения, что увеличивает габариты и энергопотребление. Решение проблемы — использование магнитных материалов с прямоугольной петлей гистерезиса, позволяющих сохранять оптимальную намагниченность после выключения поля.

Цель работы — экспериментально подтвердить возможность получения максимального прямого МЭ-эффекта в двухслойном композите на основе ферромагнитного сплава Fe-Ni (марки 50НП) с прямоугольной петлей гистерезиса и пьезокерамики $\text{PbZr}_{0,53}\text{Ti}_{0,47}\text{O}_3$ (PZT) без внешнего постоянного магнитного поля.

Изготовлена двухслойная кольцевая структура (внутреннее кольцо из сплава Fe-Ni, внешнее — из PZT с серебряными электродами). Возбуждающее переменное поле 90 А/м (57 кГц, радиальный резонанс) создавалось тороидальной катушкой, постоянное поле $H = 300\text{--}1000$ А/м — второй катушкой. МЭ-коэффициент измерялся по напряжению на обкладках PZT. Петли гистерезиса и начальная кривая намагничивания получены на магнитоизмерительной установке.

Обнаружено, что полевая зависимость магнитоэлектрического коэффициента имеет ярко выраженный максимум, соответствующий напряженности $H = 608$ А/м. Этот пик коррелирует с максимумом производной dM^2/dH и практически совпадает с максимумом магнитной восприимчивости dM/dH . Предполагается, что резкий рост намагниченности на начальной кривой обусловлен лавинным отрывом доменных границ от дефектов, что подтверждается скачкообразным поведением dM/dH . После выключения внешнего поля остаточная намагниченность создаёт внутреннее поле. Показано, что если образец предварительно намагнитить в поле 660 А/м, то максимальный МЭ-отклик достигается без внешнего магнитного поля.

Таким образом, экспериментально подтверждено, что использование ферромагнетика с прямоугольной петлей гистерезиса позволяет получить максимальный прямой МЭ-эффект в кольцевом композите Fe-Ni / PZT без приложения внешнего постоянного поля. Максимальный МЭ-эффект можно достигнуть без внешнего подмагничивания, если кольцевую структуру предварительно намагнитить в поле, напряженность которого складывается из напряженностей оптимального и размагничивающего полей и составляет 660 А/м. Показано, что максимум МЭ-отклика определяется динамикой 90-градусных доменных границ, а не 180-градусных, что важно для понимания физики МЭ-эффекта и оптимизации композитов.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РНФ № 24-12-20010

Гидролитическая конверсия магний-натрий фосфатной керамики для биомедицинских применений

Е. С. Климашина^{а,б,*}, П. Е. Середенко^а, А. К. Пупанова^а,
Ю. Р. Рассолова^{а,б}, А. М. Мурашко^{а,б}, В. И. Путляев^{а,б}

^а Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва, 119991 Россия

^б Факультет наук о материалах МГУ имени М.В.Ломоносова, Москва, 119991 Россия

*e-mail: klimashinaes@my.msu.ru, +74959392469

На сегодняшний день материалы, используемые для создания биокерамики для замены костной ткани, обладают рядом недостатков, среди которых низкая растворимость и медленная деградация при имплантации *in vivo*. Это заставляет искать более перспективные химические соединения для создания биокерамики с улучшенными свойствами. Обнадёживающим выглядит семейство фосфатов магния-натрия (MgNaP), которое можно использовать для создания рассасывающейся биокерамики для инженерии костной ткани. Недавние исследования фосфатов магния установили их более высокую способность к растворению *in vitro* и *in vivo* со скоростью, сопоставимой с образованием новой костной ткани организма. Помимо этого, магний (Mg) является важным элементом в организме человека, так как играет существенную роль в костном метаболизме, стабилизации ДНК и развитии скелета. Кроме того, керамика на основе фосфатов магния будет обладать повышенной прочностью за счет меньшего радиуса иона магния и, потому, более плотной и прочной кристаллической решеткой, а введение натрия будет способствовать улучшению биорезорбции. Несмотря на все перечисленные потенциальные преимущества и перспективы, керамические материалы на основе фосфатов магния, фосфатов магния-натрия – мало разработанная область как в фундаментальных, так и в прикладных аспектах [1].

Отработана воспроизводимая методика синтеза однофазного ортофосфата магния $Mg_3(PO_4)_2$ твердофазным методом, на ее основе адаптированы и апробированы методики получения натрий-магниевых фосфатов, $MgNaPO_4$. Методами РФА, РЭМ выявлены закономерности фазовых превращений указанных фосфатов. Методом ТГ/ДТА исследована термическая стабильность синтезированных фосфатов и подобраны температуры спекания керамических образцов.

Изучено поведение керамических образцов в водных и буферных средах. Показано, что гидролитическая конверсия является pH-зависимым процессом, позволяющим управлять скоростью резорбции и фазовым составом керамических материалов.

Показана принципиальная возможность гидролитической конверсии магний-натрий фосфатной керамики с сохранением целостности образцов и направленной модификацией поверхности. Это открывает перспективы для разработки новых биоматериалов и технологий для регенерационной медицины.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 26-29-20164, <https://rscf.ru/project/26-29-20164/>.

1. Pupanova A.K., Klimashina E.S., Murashko A.M., Filippov Ya Yu, Evdokimov P.V., Putlyaev V.I. // Russian Journal of Inorganic Chemistry. 2025. V. 70. № 10. P. 1483-1492. doi:10.7868/S3034560X25100063.

Получение биосовместимых Са содержащих фосфатов конверсией в высокоосновных растворах

А. В. Кнотько*, А. Т. Одинаева, А. А. Попов, О. О. Сулайманова

*ФГБОУ ВО Московский государственный университет, Москва, 119991 Россия***e-mail: knotkoav@my.msu.ru, +74959394259*

Применение кальций-фосфатных материалов для лечения дефектов костной ткани определяется комбинацией их свойств, таких, как прочностные характеристики, биорезорбируемость, скорость схватывания и твердения для реакционно твердеющих (цементных) материалов, используемых для лечения костных дефектов сложной формы. Резорбируемостью кальций-фосфатных материалов можно эффективно управлять через изоморфные замещения как в катионной, так и в анионной подрешетках. Этот подход может быть использован и для повышения резорбируемости материалов реакционного твердения на основе гидроксиапатита (наиболее стабильного из фосфатов кальция), например при катионном замещении, обусловленном условиями синтеза. При этом получение цементных кальций-фосфатных материалов через реакцию более кислой твердой фазы (в том числе с частичным замещением кальция на магний) с высокосной затворяющей жидкостью, являющейся источником повышающих резорбируемость получаемого цемента катионов Na^+ и/или K^+ практически, не было исследовано до настоящего времени. Анионное замещение фосфат-иона на сульфат-ион также, как можно ожидать, может быть проведено через конверсию сульфата кальция в высокоосновных фосфатных растворах, причем осуществление такого замещения при высокотемпературной твердофазной реакции затруднено термическим разложением сульфата. Кроме того, подобная конверсия в высокоосновных растворах может быть применения и к сформированным объектам из гидравлически отвержденного двуводного гипса или затвердевшего бруштитного цемента.

В работе исследованы реакции брушита $\text{CaHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, монетита CaHPO_4 , пирофосфата кальция, двуводного гипса $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (в том числе гидравлически отвержденного) с водными растворами Na_2HPO_4 , $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$, Na_3PO_4 , смеси Na_2HPO_4 и Na_3PO_4 . Методом РФА показано формирование слабозакристаллизованного замещенного апатита $\text{Ca}_{5-0.5x}(\text{PO}_4)_3-x(\text{HPO}_4)_x\text{OH}$ при высоких pH раствора (при содержании в нем Na_3PO_4), при обработке порошка гипса гидрофосфатными растворами наблюдалось формирование брушита, структурно сходного с двуводным гипсом, хотя равновесной формой фосфата кальция при этих значениях pH (>8) является апатит $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$. При конверсии отвержденного гипса реакция идет в приповерхностной области. Образования упоминавшейся в некоторых источниках фазы $(\text{NH}_4)_2\text{Ca}(\text{HPO}_4)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ при реакции солей кальция с раствором гидрофосфата аммония не наблюдалось.

Методом РСМА подтверждено частичное вхождение Na и S в формирующийся кальцийсодержащий фосфат. Показано, что в случае обработки небольшим количеством высокоосновного фосфатного раствора порошков брушита или монетита образуется реакционно твердеющий материал.

С. С. Копытин ^{а,*}, Е. К. Белоногов ^{б, в}^аАО «ВЗПП-Микрон», Воронеж, 394033 Россия^б ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия^в ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Воронеж, 394006 Россия

*e-mail: kopytin-stanislav@rambler.ru, +79192495118

В работе исследован процесс фазового превращения $\text{PdO} \rightarrow \text{Pd}$ in situ при нагреве свободных эпитаксиальных плёнок в вакууме в электронографе ЭГ-100М. Предварительно, тонкие плёнки Pd наносили при температуре 450°C на поверхности 001 монокристалла NaCl методом термического испарения в вакууме; далее синтезировали PdO термообработкой на воздухе (400, 550 и 700°C) плёнок Pd. Методом ДБЭ in situ получены электронограммы, проведен анализ динамики процесса восстановления PdO до Pd. На рис. 1 представлен фрагмент электронограммы, интерпретация которой позволила выявить все варианты взаимной ориентации кристаллитов Pd/PdO.

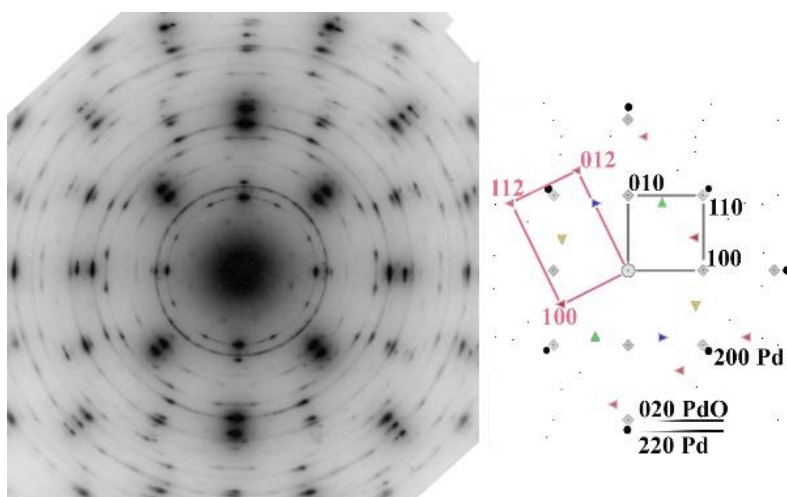


Рис.1 Электронограмма пленки Pd/PdO и её интерпретация.

Установлены ориентационные соотношения: $(001)[110] \text{ Pd} \parallel (001)[010] \text{ PdO}$; четыре эквивалентных ориентации $(001)\langle 120 \rangle \text{ Pd} \parallel (021)[100] \text{ PdO}$, что согласуется с результатами исследований [1] эпитаксиальных гетероструктур Pd/PdO. Восстановление протекает по

механизму топотаксического превращения с соблюдением соотношения $(112)[1\bar{1}\bar{1}] \text{ Pd} \parallel (100)[011] \text{ PdO}$. В итоге формируется плёнка Pd с двухосной текстурой и дисперсной - измельчённой зёрной структурой.

Сохранение рефлексов 211 PdO подтверждает факт роста зёрен Pd внутри матрицы PdO с сохранением кристаллографической преемственности, а не путём случайной нуклеации. В работе [2] выявлены два механизма окисления (медленный и быстрый с эпитаксиальной и произвольной ориентацией Pd/PdO, соответственно) и зависимость скорости восстановления от ориентации PdO (наиболее стойкая плоскость 001). В наших экспериментах фазовое превращение $\text{PdO} \rightarrow \text{Pd}$ проходило практически мгновенно (безинерционно), если температура более 650°C.

1. С.С. Копытин, А.В. Костюченко, Е.К. Белоногов // Поверхность. РСИНИ, 2026, № 5, с. 42–52

2. Yokosawa T., Tichelaar F. D., Zandbergen H. W., // Eur. J. Inorg. Chem. 2016. V. 2016. P. 3094–3102. doi: 10.1002/ejic.201501353

С. С. Копытин ^{а,*}, Е. К. Белоногов ^{б, в}^аАО «ВЗПП-Микрон», Воронеж, 394033 Россия^б ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия^в ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Воронеж, 394006 Россия

*e-mail: kopytin-stanislav@rambler.ru, +79192495118

Методом электронографии (ЭГ-100М) исследованы фазовые превращения **Pd→PdO→Pd**. Окисление тонких плёнок **Pd** проводили термическим отжигом (ТО) на воздухе в муфельной печи и импульсным облучением ксеноновыми лампами - импульсный фотонный отжиг (ИФО); восстановление проводили ТО и ИФО в вакууме.

Установлено, что окисление (ТО и ИФО) эпитаксиальных плёнок **Pd** вызывает формирование эпитаксиальной двухфазной структуры PdO+Pd с преобладанием оксида; на электронограммах азимутальная ориентация дифракционных максимумов от PdO указывает на механизм топотаксии, т.е. формирование полидоменной структуры PdO, как результат наследования кристаллической решётки **Pd** в эквивалентных ориентациях.

ТО и ИФО приводят к окислению **Pd→PdO на воздухе и восстановлению PdO→Pd в вакууме** с сохранением закономерной текстуры, аналогичной установленной ранее для эпитаксиальных плёнок Pd/PdO на NaCl и фторфлогопите [1]. При сопряжении фаз Pd и PdO реализуется ориентационное соотношение $(112)[1\bar{1}1] \text{ Pd} \parallel (100)[011] \text{ PdO}$, которое обеспечивает энергетически выгодное (плотное сопряжение решёток) Pd/PdO. Можно ожидать, что такое же сопряжение будет реализовано и при восстановлении Pd при сохранении указанной ориентации, что обеспечит измельчение зёрновой структуры.

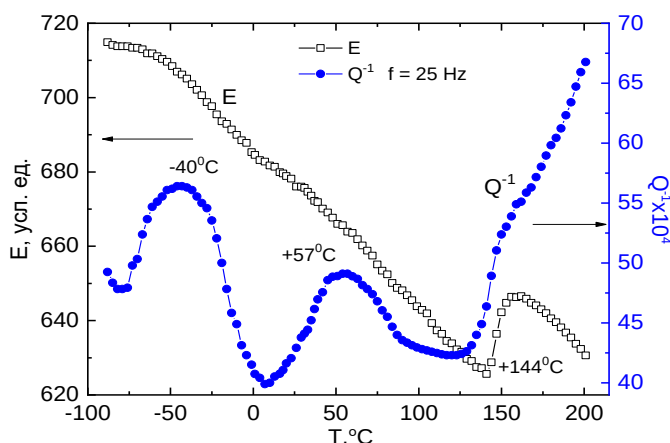
Установлены ориентационные соотношения между решетками PdO и Pd, возникающие в результате ТО и ИФО. Все ориентационные соотношения отвечают фундаментальным принципам эпитаксии, а именно, решетки совпадающих узлов и теории О-решетки. Найдены оптимальные режимы ИФО (доза, частота импульсов), обеспечивающие наиболее полные фазовые превращения **PdO-Pd и Pd-PdO, в вакууме и на воздухе, соответственно**. Выявлен эффект ИФО, проявляющийся в реализации ориентационных соотношений не характерных для ТО. Уникальные ориентации при окислении и восстановлении не характерны для изотермического (печного) отжига, обусловлены сверхвысоким нагревом при ИФО, что подавляет механизмы равновесных фазовых превращений, зарождения фаз и роста зёрен. Нагрев за доли секунды вызывает термоупругие напряжения и чрезвычайно высокую концентрацию точечных дефектов. Энергия ИФО через электронную подсистему инициирует твердофазный синтез, рекристаллизацию. «Безынерционные» механизмы фазовых превращений приводят к иным кристаллографическим ориентациям на межфазной границе **PdO-Pd и Pd-PdO** в зависимости от направления движения атомов кислорода (в кристаллическую решётку или из неё). Фазовые превращения **PdO-Pd и Pd-PdO не реальны без диффузии кислорода, поэтому они условно безынерционные**, а условие – ускоренное каналирование атомов кислорода под действием ИФО. Конкретные направления каналирования атомов кислорода обеспечивают специфические ориентационные соотношения между кристаллитами металла и его оксида.

Низкочастотное внутреннее трение в сополимерах VDF₈₈/Tr₁₂ в окрестностях температуры плавления

Л. Н. Коротков^{а,*}, М. А. Панкова^б^а ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Воронеж, 394006 Россия^б ФКОУ ВО «Воронежский институт МВД РФ», Воронеж, 394065 Россия*e-mail: l_korotkov@mail.ru

Сополимеры винилиденфторида и трифторэтилена (VDF/Tr) относятся к классу полярных полимеров. Они представляют собой аморфно-кристаллический материал, в котором объемная доля аморфной фракции обычно составляет около 50 % [1]. Сегнетоэлектрическая фаза реализуется в кристаллических ламелях, обладающих при комнатной температуре орторомбической кристаллической решеткой Cm2m [1]. Особенностью сополимера состава VDF₈₈/Tr₁₂ является то сегнетоэлектрическая фаза в нем остается устойчивой вплоть до температуры плавления.

Температурные зависимости низкочастотного внутреннего трения (Q^{-1}) и упругого модуля (E) изучали с использованием обратного маятника изгибных колебаний на частоте около 25 Гц. Образец представлял собой кремниевую пластинку с размерами 5x9x0,2 мм с нанесенной на ее поверхность пленкой сополимера толщиной $m \approx 20$ мкм.



Температурные зависимости внутреннего трения и упругого модуля VDF₈₈/Tr₁₂.

На зависимости $Q^{-1}(T)$ наблюдаются два максимума (рис). Один из них, около -40 °C связан с процессом стеклования в некристаллической фракции сополимера, а максимум около 57 °C обусловлен молекулярной подвижностью на поверхности кристаллических ламелей [1]. Модуль E , монотонно смягчающийся с повышением температуры, проходит через минимум в окрестностях 144 °C (рис). Выше этой температуры E возрастает в интервале температур $144 - 153$ °C, после чего вновь наблюдается уменьшение E , обусловленное переходом кристаллической фракции в вязкотекучее состояние.

Наблюдаемый минимум зависимости $E(T)$ свидетельствует том, что ниже температуры плавления сополимер VDF₈₈/Tr₁₂ претерпевает структурный фазовый переход, а переход в вязкотекучее состояние происходит из параэлектрической фазы.

1. Лушечкин Г.А. Полимерные пьезоэлектрики. М.: Химия. 1990. 176 с.

Исследование субструктуры пленок и керамики гидроксиапатита методом просвечивающей электронной микроскопии

Костюченко А.В.¹, Иевлев В.М.^{1,2,3}, Белоногов Е.К.²

Воронежский государственный технический университет;
МГУ имени М.В. Ломоносова;
Воронежский государственный университет

E-mail: av-kostuchenko@mail.ru, тел. 89202124561

Методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) проведено комплексное исследование гидроксиапатита (ГА, $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$) в виде тонких пленок (вч-магнетронное распыление) и ультратонких срезов керамики (спекание 1050–1200 °С) [1, 2]. Анализ данных ПЭМ, полученных для исходных и подвергнутых пластической деформации образцов, позволил установить ряд закономерностей, общих для пленок и керамики ГА. Во-первых, дислокации деформационного происхождения в объеме зерен ГА отсутствуют. Во-вторых, в ГА не обнаружены границы зерен (ГЗ), отвечающие концепции решеток совпадающих узлов. В-третьих, все ГЗ в ГА несингулярны: их след имеет вицинальную (ступенчатую) морфологию с высотой элементарной ступени $\sim 0,8$ нм ($d_{10\bar{1}0}$), что отражает послойный механизм роста зерен при наращивании и вторичной рекристаллизации: фронт роста — призматические грани $\{1\bar{1}00\}$. При сопряжении почти параллельных плоскостей разных индексов ($nd_{(h_1k_1l_1)} \approx md_{(h_2k_2l_2)}$) образуются частично когерентные границы с рядами дислокаций Памфри (рисунок 1), компенсирующих размерное и ориентационное несоответствие.

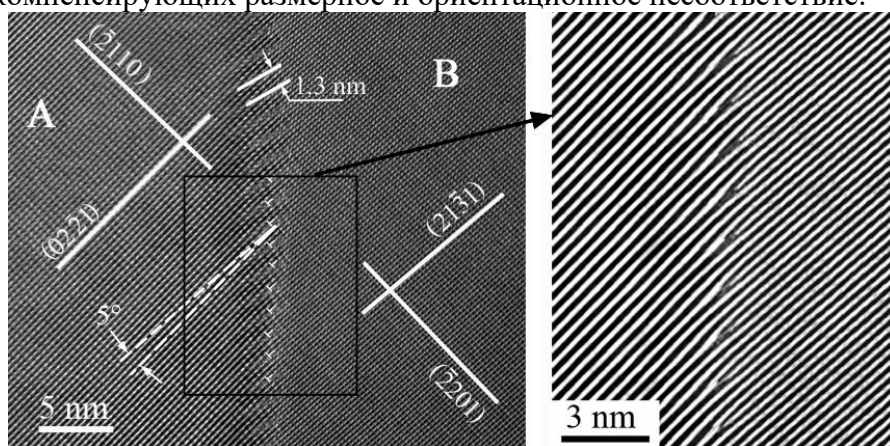


Рисунок 1. Граница зерен в керамике ГА и фурье-образ выделенной области (вставка)

Установлена высота ступеней роста зерен ГА (0,8 и 1,6 нм), отвечающая размеру кластера Познера $\text{Ca}_9(\text{PO}_4)_6$ [3], который вместе с $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ и группами PO_4 служит подвижной единицей перестройки границ. Кластерная субструктура ГА подтверждается наноиндентированием: твердость нанокристаллических пленок близка к твердости микрокристаллов ГА (~ 10 ГПа), дислокации в зоне отпечатка не образуются, а интенсивная пластическая деформация переводит микрокристаллическую керамику в нанокристаллическое состояние с включениями $\alpha\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ и аморфного фосфата кальция (твердость падает до 4,0 ГПа) — деформация идет по механизму межкластерного проскальзывания.

1. Иевлев В.М., Костюченко А.В. // Неорган. матер. 2018. Т. 54. № 7. С. 756.
2. Иевлев В.М., Костюченко А.В., Белоногов Е.К. // Неорган. матер. 2013. Т. 49. С. 416.
3. Posner A. S., Betts F. // Acc. Chem. Res. 1975. 8. P. 273

Структурно-фазовые превращения на границах раздела в многослойных оксидных системах по данным рентгеновской дифрактометрии

Костюченко А.В., Середин Д.А., Шакуров А.Р., Никонов А.Е., Е.Н. Федорова

Воронежский государственный технический университет

E-mail: av-kostuchenko@mail.ru, тел: 89202124561

Структурная и химическая стабильность межфазных границ определяет ресурс мемристивных устройств на основе оксидных слоёв: ток высокой плотности через филамент вызывает локальный разогрев, инициирующий взаимную диффузию и твердофазные реакции на интерфейсах [1, 2]. Детектирование продуктов этих реакций в области единичной границы наноразмерных слоев затрудняется малым количеством вещества. В работе в качестве модельного объекта использована архитектура из 50 чередующихся бислоёв нанометровой толщины: она многократно увеличивает суммарную площадь интерфейсов и объёмную долю продуктов взаимодействия, переводя локальные процессы на границах в область чувствительности стандартных дифракционных методов. В качестве объектов исследования были получены структуры $[\text{Nb}_2\text{O}_5/\text{Cr}]_{50}$, $[\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{Cr}]_{50}$, $[\text{ZrO}_2(\text{Y})/\text{Cr}]_{50}$, $[\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{ZrO}_2(\text{Y})]_{50}$ и $[\text{Nb}_2\text{O}_5/\text{ZrO}_2(\text{Y})]_{50}$ с периодом бислоя 3,5–8,1 нм методом последовательного циклического ионно-лучевого распыления двух мишеней соответствующего состава. Структурно-фазовые превращения в многослойных структурах проводили термическим отжигом в вакууме в диапазоне 200–650 °С. Структурно-фазовый анализ — методом рентгеновской дифрактометрии (Bruker D2 Phaser, Cu K_α) в больших и малых углах (РД и МРР).

По данным МРР во всех системах брэгговские пики малоугловой дифракции сохраняются во всех системах вплоть до 650 °С, т. е. слоистая архитектура не деградирует. Наибольшее структурное совершенство у $[\text{ZrO}_2(\text{Y})/\text{Cr}]_{50}$: вблизи отражения $\text{Cr}(110)$ наблюдаются сателлиты Киссинга, свидетельствующие о резкости границ и однородности периода. Рекристаллизация при ТО идёт внутри слоёв: сумма размеров кристаллитов ZrO_2 (3,7 нм) и Cr (5,6 нм) сопоставима с периодом бислоя (8,0–9,0 нм).

По данным РД в системах с хромом при 600–650 °С развивается перенос кислорода от оксида к металлу: формируется Cr_2O_3 с аксиальной текстурой $[001]$, Nb_2O_5 восстанавливается до NbO (текстура $[100]$), Ta_2O_5 — до TaO_2 и металлического Ta ; в системе с Ta_2O_5 процесс начинается при более высокой температуре. Для пары $\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{Cr}$ такой перенос запрещён объёмной термодинамикой ($|\Delta_f G^\circ(\text{Ta}_2\text{O}_5)| > |\Delta_f G^\circ(\text{Cr}_2\text{O}_3)|$) и реализуется за счёт понижения поверхностной и интерфейсной энергии при смене границ $\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{Cr}$ на границы оксид $\text{Ta}/\text{Cr}_2\text{O}_3$. Оксид-оксидные системы (период 3,6 нм) в исходном состоянии рентгеноаморфны; кристаллизация начинается выше 600 °С для слоёв с Ta_2O_5 и выше 650 °С — с Nb_2O_5 . При этом полиморфная модификация ZrO_2 определяется составом соседнего слоя: в присутствии Nb_2O_5 образуется моноклинный YNbO_4 , связывающий иттрий, и кристаллизуется тетрагональная ($P4_2/nmc$) модификация ZrO_2 , тогда как Ta_2O_5 не взаимодействует с Y и стабилизируется кубическая ($Fm-3m$) модификация $\text{ZrO}_2(\text{Y})$.

Таким образом, использование многослойных гетероструктур позволило путем кратного увеличения границ раздела получить интегральный дифракционный сигнал, достаточный для наблюдения локальных процессов на границах раздела оксидных и металлических пленок сложного состава.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FZGM-2026-0003).

1. Бабкина И.В., Ситников А.В., Калинин Ю.Е. и др. // ФТТ. 2025. Т. 67. Вып. 5. С. 817.
2. Филатов Д.О., Коряжкина М.Н., Антонов Д.А. и др. // ФТТ. 2020. Т. 62. Вып. 4. С. 556.

Макрокинетика и динамика сорбции с движущимися границами химических реакций на металл-ионообменных композитах для интенсивной нанотехнологии

Кравченко Тамара Александровна

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», Воронеж

*e-mail: krav280937@yandex.ru

Бифункциональные металл-ионообменные сорбенты — это перспективные наноматериалы за счет беспрецедентного роста числа адсорбционных наночастиц, синергетической сорбции, усиленной химическими и электрохимическими реакциями на наночастицах металлов.

Впервые построена наиболее общая теория макрокинеки и динамики сорбции с учетом движущихся границ химических и электрохимических реакций. Решение сопряженной интегро-дифференциальной задачи дано в виде зависимостей безразмерных пространственных координат $\xi_i(\tau)$ движения границ реакций от времени

$$\frac{d\xi_1}{d\tau} = -\left(1 - \frac{i}{i_{\text{lim}}}\right) \frac{d_{12}\xi_2}{Z_c}, \quad (6)$$

$$\frac{d\xi_2}{d\tau} = -\left(1 - \frac{i}{i_{\text{lim}}}\right) \frac{\xi_1(\xi_2 - \xi_1) + d_{11}\xi_2}{Z_c}. \quad (7)$$

Здесь $Z_c = f(\xi_1, \xi_2, Bi)$; $d_{ij} = D_i / (k_j \delta'_j R_0)$ – безразмерный комплекс кинетических констант; δ'_i – толщина реакционного слоя; $i_{\text{lim}} = zFDc_0 / \delta'$ – плотность предельного диффузионного тока; $\delta' = \delta(1 + \delta/R_0)^{-1}$ – толщина внешнел диффузионного слоя; $Bi = D_3 R_0 / (D_2 \gamma \delta)$ – безразмерный диффузионный критерий Био; $\xi_i(t)$ ($i=1,2$) – координаты фронтов реакций.

Соответственно найденные значения $\xi_i(\tau)$ служат для расчета степени полноты сорбции. Теория учитывает концентрационные и токовые эффекты, а также первичный и вторичный размерные факторы металл-полимерного сорбента посредством введения общего наноразмерного комплексного параметра, Показана определяющая роль наноразмерного комплекса и внешнего поляризующего тока в кинетике и динамике сорбции.

Заявленная работа является приоритетом отечественной науки и нанотехнологии деоксигенации воды.

1. Кравченко Т.А., Полянский Л.Н., Калиничев А.И., Конев Д.В. Нанокмозиты металл-ионообменник. М.: Наука, 2009. 391с.

2. Кравченко Т.А., Конев Д.В., Вахнин Д.Д., Чумакова А.В.. Электродинамическая модель редокс-сорбции кислорода металлсодержащими нанокмозитами // Российские нанотехнологии, 2019, том 14, № 11–12, с. 15–22.

3. Вахнин Д.Д., Фертикова Т.Е., Полянский Л.Н., Козадеров О.А., Кравченко Т.А. Электродеоксигенация воды нанокмозитом, содержащим медные металлические наночастицы и ионообменную матрицу // Российские нанотехнологии, 2022, том 17, № 6, с. 799–806.

Микроструктура биокерамик на основе биорезорбируемых слоистых фосфатов кальция

Е.В. Кукуева

НИИ Курчатовский институт, Москва, 123098 Россия

e-mail: elena.kukueva@gmail.com

Для заживления дефектов костных тканей используют имплантаты из различных материалов. Поскольку костная ткань представляет собой композит на основе гидроксиапатита кальция $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ (ГА) и белка коллагена с многоуровневой структурной организацией компонентов, то использование материалов на основе ГА выглядит, как логичный выбор. Однако керамические материалы непосредственно на основе ГА имеют низкую скорость резорбции (растворения) в тканях организма и слабо способствуют росту новой ткани, поэтому одним из вариантов получения биорезорбируемых материалов является использование смесей более растворимых фосфатов кальция, например, на основе трикальцийфосфата $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ (ТКФ) и пирофосфата кальция $\text{Ca}_2\text{P}_2\text{O}_7$ (ПФК), ГА и ТКФ.

Для получения биокерамики необходимо использовать мелкокристаллические порошки необходимого состава, гомогенно смешанные между собой. В настоящей работе был выбран метод получения двухфазной биокерамики, используя единый, специально подготовленный прекурсор. В качестве такого прекурсора был выбран октакальциевый фосфат $\text{Ca}_8(\text{HPO}_4)_2(\text{PO}_4)_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (ОКФ), и его замещенная формы, в которой одна из HPO_4 -групп замещена на остаток дикарбоновой кислоты, которые при спекании дают смесь ТКФ, ПФК и ГА (в зависимости от степени замещения в ОКФ). Для сравнения были также подготовлены керамики, получаемые не из единого прекурсора, а из механических смесей данных фосфатов кальция.

При термической обработке октакальциевых фосфатов исходная морфология их кристаллов, которые представляют собой пластинчатые частицы, сохраняется. Были проведены электронно-микроскопические и рентгенографические исследования как исходных ОКФ, так и получающихся на их основе биокерамик, показано, что микроструктура получаемой из ОКФ керамики демонстрирует лучшее уплотнение, отличается меньшей пористостью и более гомогенным распределением компонентов по сравнению с керамиками, полученными из механических смесей.

Работа частично проведена в рамках выполнения государственного задания НИИ «Курчатовский институт».

Электронно-микроскопическое исследование поверхности и структурно-фазового состояния приповерхностных слоев сплава ВТ1-0 после обработки лазерными импульсами пикосекундной длительности.

И. С. Павлов^а, Ю. Р. Колобов^б, И.А. Стучебрюхов^в, А. С. Кумсков^г, А.Л. Васильев^{г,*}

^а РТУ МИРЭА, 119454, пр-кт Вернадского, д. 78, Москва, Россия

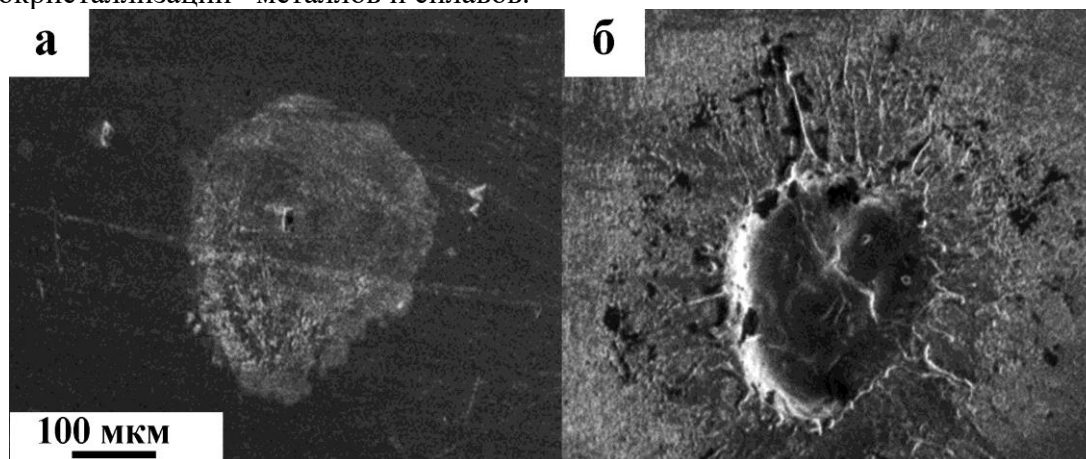
^б Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, 142432, пр. академика Н.Н. Семенова, д. 1, Черноголовка, Россия

^в Институт общей физики им.А.Н.Прохорова РАН, 119991, ул. Вавилова 38, Москва, Россия

^г Отделение «Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ "Курчатовский институт" 119333, Ленинский пр.59, Москва, Россия

*e-mail: a.vasiliev56@gmail.com

Влияние обработки лазерными импульсами разной энергии поверхности титанового сплава ВТ1-0 модифицированной лазерным импульсом ($E \approx 0,01$ Дж и $E \approx 0,8$ Дж, $\tau \approx 60$ пс, $\lambda = 527$ нм) исследовались методами растровой электронной микроскопии, просвечивающей и просвечивающей растровой электронной микроскопии с возможностью энергодисперсионного рентгеновского микроанализа. В пределах исследуемого масштаба исходный сплав представляет собой монокристаллическую α -фазу титана с ГЦК включениями карбидов титана. Установлено, что толщина области с нанокристаллической структурой, сформировавшейся при сверхбыстрой кристаллизации расплавленного при лазерном облучении приповерхностного слоя, составляет 0,9 мкм и она представлена разориентированными кристаллитами размерами от десятков до сотен нанометров. Некоторые кристаллиты проявляют двойникование, часто наблюдаемое при сверхбыстрой нанокристаллизации металлов и сплавов.



РЭМ изображение титанового сплава ВТ1-0 после воздействия лазерными импульсами энергией: (а) $E \approx 0,01$ Дж и (б) $E \approx 0,8$ Дж.

Размеры кристаллитов и микроструктура существенно различаются в образцах после воздействия лазерными импульсами с энергией $E \approx 0,01$ Дж и $E \approx 0,8$ Дж.

**Безызлучательные переходы и передача энергии атомным кластерам
при импульсной фотонной обработке гетероструктуры Si/C...Si/C:
синтез нанокристаллических плёнок SiC**

С.Б. Куцев^а, С.А. Солдатенко^{а*}, Т.Л. Тураева^а, Б.М. Даринский^б, С.Н. Чернышов^б

^аФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»,
Воронеж, 394026 Россия

^бФГБОУ ВО Воронежский государственный университет,
Воронеж, 394018 Россия

*e-mail: cossack408@mail.ru, +79518650433

В работе представлены экспериментальные результаты исследований нанокристаллических плёнок SiC, синтезированных при импульсной фотонной обработке гетероструктуры Si/C...Si/C, и впервые выполнена интерпретация результатов на основе модели безызлучательных переходов с передачей энергии излучения атомным кластерам.

Многослойные периодические гетероструктуры Si/C/...Si/C (до 30 периодов, толщина одного слоя: Si ~ 27 нм, C ~ 13 нм) наносили на подложки монокристаллического кремния (001) методом ионно-лучевого распыления.

Фотонную обработку (ФО) гетероструктуры Si/C...Si/C на кремниевой подложке проводили в среде аргона излучением ксеноновых ламп (спектр 200–1200 нм, максимумы при 0,4 и 0,9 мкм) в импульсном режиме (длительность импульса 10^{-2} с, общее время облучения 1,5–3,0 с) [1].

Методами рентгеновской дифрактометрии, дифракции быстрых электронов и просвечивающей электронной микроскопии исследованы фазовый состав и субструктура пленок, образующихся в результате ФО. Установлено, что ФО обеспечивает существенное энергетическое воздействие на приповерхностный слой гетероструктуры Si/C толщиной 0,1–1,2 мкм, которого достаточно для формирования нанокристаллических пленок β -SiC по всей толщине гетероструктуры. Образование карбида кремния инициируется при достижении плотности энергии $E_i \approx 265$ Дж/см².

Для объяснения полученных результатов использована теоретическая модель, согласно которой при релаксации возбуждённого электрона энергия передаётся не фотонам (люминесценция), а непосредственно атомному кластеру, в котором локализовано возбуждение [2]. Выполнены оценки характерного времени поглощения фотона (~ 0,01 фс), безызлучательной релаксации (~ 1 фс), теплодиффузии из пленки в подложку (~ 10^{-7} с). Показано, что экспериментально наблюдаемый порог E_i соответствует достижению критической скорости подачи энергии излучения, при которой активируется реакция образования карбида кремния. Отмечается роль эффекта изменения межатомного расстояния при перестройке типа гибридизации $sp^2 \rightarrow sp^3$. Образование нанокристаллической структуры (5 – 15 нм) и произвольной ориентации зёрен связывается с быстрым оттоком тепла в подложку после окончания импульса. Результаты могут быть использованы при оптимизации режимов ИФО для управляемого синтеза нанокристаллических плёнок SiC с заданной структурой.

1. Куцев С.Б., Солдатенко С.А., Тураева Т.Л., Ситников А.В., Е.К. Белоногов // Сб. тез. X Международной научной конференции «Актуальные проблемы физики твердого тела». Минск, Беларусь. 2023. С. 200.

2. Darinskii B.M., Yudin, L.Y. // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2011. V. 75. № 10. P. 1309–1312. doi: 10.3103/S1062873811100108

Высокоэнтропийная резорбируемая биокерамика на основе структур с тетраэдрическими анионами для регенерации костной тканиН. В. Леонтьев^{а,б,*}, Д. Д. Погольская^а, П. В. Евдокимов^{а,б}, В. И. Путляев^{а,б}^а Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Россия^б Факультет наук о материалах МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва, Россия*e-mail: ganzauskas@ya.ru, +74959392469

Регенеративный подход в костной инженерии требует создания растворимых (резорбируемых) материалов, способных постепенно замещаться костной тканью. Биологическую активность такого рода материалов можно увеличить путем введения в их состав различных неорганических ионов – кофакторов костных морфогенетических белков. Таким образом возможно повысить остеоиндуктивные свойства керамического материала, то есть его способность активно инициировать и ускорять процессы остеогенеза. В качестве кристаллохимической основы для «нагрузки» ионами выбрана структура глазерита – одна из универсальных структур с тетраэдрическими анионами (общая формула A_2XO_4), родственная трикальцийфосфату.

Повышенная конфигурационная энтропия глазеритных твердых растворов состава $(Ca, Mg, Sr, Na, K, Cu, Zn)_a(PO_4, SiO_4, GeO_4)_b$ (максимальное значение $S_{конф} = 7.66R$) обеспечивает энтропийную стабилизацию высокотемпературной фазы и подавляет ее распад даже в условиях медленного охлаждения; в то же время показано, что стабилизация глазеритных высокотемпературных твердых растворов с «простым» составом, $Ca_{4+x}Na_2(PO_4)_{2+2x}(SiO_4)_{1-x}$ ($x = 0.33, 0.66$) и $Ca_{4+y}Na_{2-2y}(PO_4)_{2+2y}SiO_4$ ($y = 0.25, 0.5, 0.75$), требует быстрого охлаждения (заковки) от 1500 °С.

Методом стереолитографической 3D-печати на основе составов $(Ca, Mg, Sr, Na, K, Cu, Zn)_a(PO_4, SiO_4, GeO_4)_b$ сформированы макропористые скаффолды с взаимосвязанной системой пор, необходимой для проникновения внутрь материала костной ткани, сосудов и клеток. Керамика состава $Ca_{6.3}Mg_{0.175}Sr_{0.175}Cu_{0.175}Zn_{0.175}Na_{1.5}K_{1.5}(PO_4)_5(SiO_4)_{0.25}(GeO_4)_{0.25}$ характеризуется линейной усадкой ~25%, размер зерен составляет 20–40 мкм. На границах зерен вероятно образование стеклофазы, обогащенной тяжелыми элементами и предположительно выступающей в качестве жидкофазной добавки при спекании.

Исследование растворения в модельных физиологических средах показало, что многокомпонентная глазеритная керамика обладают улучшенной динамикой резорбции в сравнении с традиционными гидроксиапатитом и трикальцийфосфатом. Варьирование состава позволяет целенаправленно смещать pH продуктов гидролиза в сторону физиологического диапазона (7.35–7.45), что крайне важно для предотвращения воспалительных реакций. Методом ИСП-МС определены концентрационно-временные профили высвобождения ионов Mg^{2+} , Zn^{2+} , Co^{2+} , Mn^{2+} из керамики; одновременно биологические испытания подтвердили отсутствие острой цитотоксичности: образцы, содержащие более 8 элементов, стимулируют пролиферацию фибробластов человека уже в первые сутки.

Таким образом, высокоэнтропийная биокерамика на основе глазеритных структур с тетраэдрическими анионами представляет собой перспективную платформу для создания макропористых резорбируемых имплантатов с управляемой резорбируемостью и выраженной остеоиндуктивностью.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 22-19-00219-П.

**Особенности низкочастотного внутреннего трения в твердом растворе
 $0.9\text{Pb}_{0.95}\text{Sr}_{0.05}(\text{Zr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48})\text{O}_3-0.05\text{Pb}(\text{Zn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3-0.05\text{Pb}(\text{Mn}_{1/3}\text{Sb}_{2/3})\text{O}_3 + 0.001 \text{CeO}_2$**

А.А. Камынин^а, Д.А. Лисицкий^{б,*}, Н. В. Коротунов^а, А.И. Бочаров^а, Н.А. Толстых^а, И.И. Попов^а, Л. Н. Коротков^а

^аФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Воронеж,
 394006 Россия

^бАО НВП «ПРОТЕК», Воронеж, 394028 Россия

*e-mail: l_korotkov@mail.ru

Твердые растворы цирконата – титаната свинца (ЦТС) являются наиболее эффективными пьезоэлектрическими материалами. Для получения требуемых свойств в их базовый состав вводят легирующие добавки, а также варьируют режимы технологического процесса. Цель данной работы – изучить особенности низкочастотного внутреннего трения в новом пьезокерамическом материале состава $0.9\text{Pb}_{0.95}\text{Sr}_{0.05}(\text{Zr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48})\text{O}_3-0.05\text{Pb}(\text{Zn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3-0.05\text{Pb}(\text{Mn}_{1/3}\text{Sb}_{2/3})\text{O}_3 + 0.1 \text{mol}\% \text{CeO}_2$ и влияние на них температуры его спекания.

Образцы изготавливали по двухстадийной керамической технологии из смеси соответствующих оксидов и карбонатов. Синтез проводили при температуре 800 °С. Спекание осуществляли на воздухе при температурах $T_a = 1100, 1150, 1200$ и 1250 °С в течение 4 часов. Рентгеноструктурный анализ показал, что материалы имеют тетрагональную решетку перовскита $P4mm$ с небольшим содержанием примесных фаз. Для измерений внутреннего трения (Q^{-1}) использовали образцы в форме пластины с размерами $14 \times 3 \times 0,5$ мм. Эксперимент проводили в интервале температур $20 - 350$ °С на частоте около 20 Гц с помощью маятника изгибных колебаний. Полученные результаты представлены на рисунке.

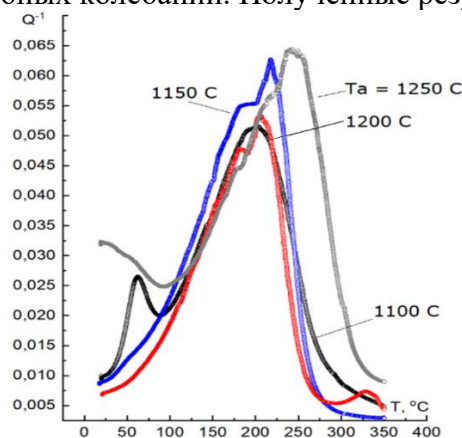


Рис. Зависимости внутреннего $Q^{-1}(T)$ в образцах, отличающихся температурой спекания $T_a = 1100, 1150, 1200$ и 1250 °С

Их анализ показал, что для всех образцов наблюдается глобальный пик Q^{-1} , состоящий из двух отдельных максимумов, один из которых, по-видимому, обусловлен взаимодействием доменных границ с вакансиями атомов кислорода, а второй – с вакансиями атомов свинца. С повышением T_a происходит увеличение максимумов Q^{-1} и смещение их в высокотемпературном направлении. Для образцов, полученных спеканием при $1100, 1200$ и 1250 °С наряду с глобальным в спектре Q^{-1} регистрируются более слабые пики внутреннего трения, природа которых обсуждается.

Анализ фазового состава композитных пленок Al-Si, полученных методом ионно-лучевого распыления

А. А. Лутченко^{а,*}, К. А. Барков^а, С. А. Ивков^а, И. В. Польшин^а, Е.И. Гайворонская^а, Е. С. Керсновский^а, А.И. Чукавин^б, А.Н. Бельтюков^б, А. Е. Никонов^в,
А. В. Ситников^в

^а ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия

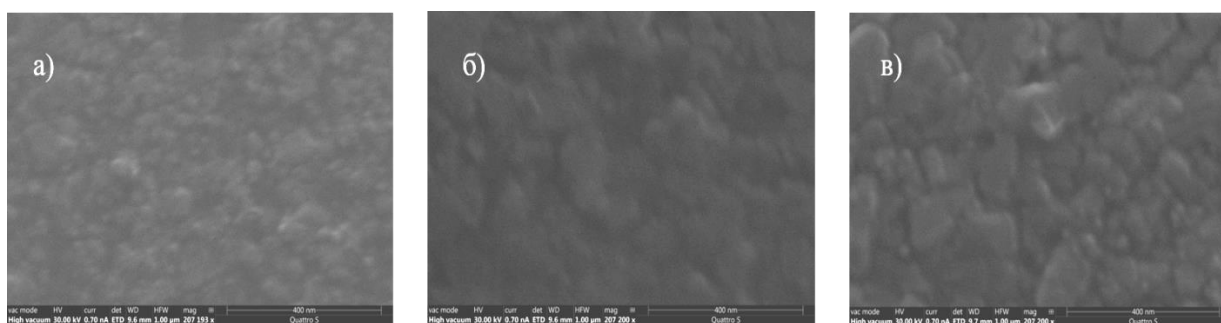
^б УдмФИЦ УрО РАН, Ижевск 426067, Россия

^в ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Воронеж 394006, Россия

*e-mail: lutchenko@phys.vsu.ru , +79081887195

Ионно-лучевое распыление представляет собой перспективный метод получения тонких плёнок, широко применяемых в микроэлектронике для металлизации интегральных схем и формирования омических контактов. Данный метод позволяет создавать плёнки с контролируемым фазовым составом и структурой. Однако ввиду неравновесного характера процесса возможно формирование метастабильных фаз, которые невозможно получить равновесными методами. Поэтому, несмотря на преимущества, практическая реализация метода сопряжена с рядом сложностей. Одна из проблем связана с образованием в плёнках Al-Si метастабильной фазы Al_3Si , которая отсутствует на равновесной диаграмме состояний и трудно идентифицируется стандартными методами из-за малых размеров нанокристаллов.

В связи с этим данная работа посвящена вопросу идентификации фазы Al_3Si , а также комплексному исследованию фазового состава, электронной структуры и морфологии тонких плёнок Al-Si, полученных ионно-лучевым распылением. В результате проведенного исследования элементного состава плёнок Al-Si по данным РФЭС обнаружено, что увеличение расстояния между навесками кремния на подложке алюминия составной мишени и после травления поверхности пленок ионами Ar^+ концентрация Al изменилась, существенно увеличившись, и составив от ~43 до 52 at.%. Это согласуется с полученными данными УМРЭС, которые показывают увеличение содержания алюминия в плёнках Al-Si сопровождающихся изменением локального электронного строения и усилением взаимодействия между компонентами системы. По РЭМ-изображениям видно, что увеличение кластеров связано с увеличением содержания алюминия, что подтверждается данными элементного и фазового составов.



РЭМ-изображения плёнок Al-Si с концентрацией Al 43 (а), 48 (б) и 52 (в) ат. %.

1. Terekhov et al. // Phys. Solid State. **2018**. V.60. P. 1021-1028.

А. М. Мурашко^{а,б*}, В. А. Битанова^б, П. В. Евдокимов^{а,б}, В. И. Путляев^{а,б}^а *Факультет наук о материалах МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, 119991 Россия*^б *Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, 119991 Россия***e-mail: murashkoam@my.msu.ru, +79613170013*

Остеохондральные (костно-хрящевые) дефекты, затрагивающие матрикс хрящевой и подлежащей костной ткани, а также сопрягающие их биоинтерфейсы, представляют собой серьезную проблему для современной регенеративной медицины. Перспективным подходом к реконструкции таких сложных повреждений является использование структурно-гетерогенных имплантатов со сложной архитектурой, сочетающих в себе жесткий керамический каркас и гибкий гидрогелевый слой. В данной работе исследованы физико-химические и технологические особенности формирования многослойных конструкций, включающих керамику, гидрогели на основе полиэтиленгликоль диакрилата (ПЭГДА) различной молекулярной массы, а также композитные материалы (гидрогель, наполненный неорганическими частицами).

Для получения керамического компонента были разработаны фоточувствительные суспензии на основе порошков фосфатов кальция-натрия, включая трикальцийфосфат (ТКФ $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$) и фазу *A* ($\text{Ca}_{2.5}\text{Na}(\text{PO}_4)_2$). Путем варьирования содержания компонентов были оптимизированы реологические характеристики данных суспензий для проведения стереолитографической 3D печати. Исследование кинетики уплотнения полученных материалов показало, что введение фазы *A* способствует интенсификации процессов спекания. Наиболее эффективное уплотнение зафиксировано для бифазного состава с мольным соотношением ТКФ-фаза *A*, равным 1:1, обеспечивающего достижение относительной плотности до 95 %.

С целью воссоздания хрящевого и переходного слоев отработаны условия стереолитографического формирования гидрогелевых материалов на основе ПЭГДА. Исследование вязкоупругих характеристик полимерных матриц показало, что уменьшение молекулярной массы и повышение концентрации ПЭГДА закономерно увеличивают жесткость гидрогелей. Для создания переходных зон разработаны составы гидрогелей, наполненных фосфатами кальция.

Для интеграции химически и структурно-механически различных частей скаффолда в единую тканеинженерную конструкцию предложен и апробирован метод стереолитографического формирования гидрогеля непосредственно на поверхности предварительно спеченной бифазной керамики. Установлено, что адгезия гидрогелевых материалов к керамической подложке немонотонно зависит от молекулярной массы ПЭГДА. Показано, что сопряжение гидрогелевого слоя с жестким керамическим каркасом приводит к синергетическому изменению вязкоупругого отклика, повышая общую жесткость гетерогенного имплантата при сохранении выявленных для индивидуальных гидрогелей концентрационных закономерностей. Полученные результаты закладывают фундаментальную технологическую основу для производства персонализированных мультиматериальных скаффолдов с функционально-градиентными свойствами для остеохондральной пластики.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 23-79-10103-П.

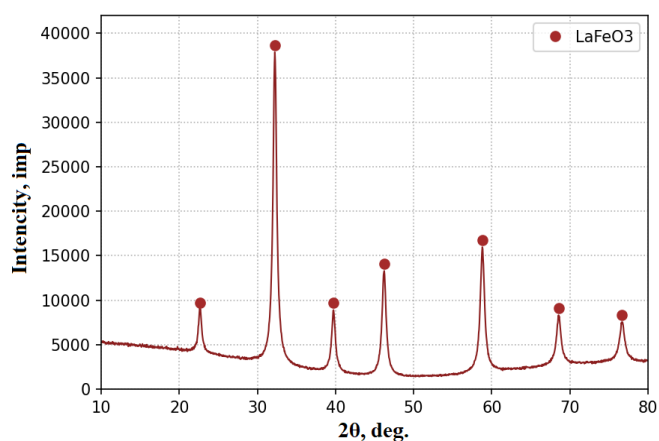
Влияние допирования ионами Mn^{2+} на структуру и газочувствительные свойства $LaFeO_3$

Я. М. Немых*, В. Ф. Кострюков

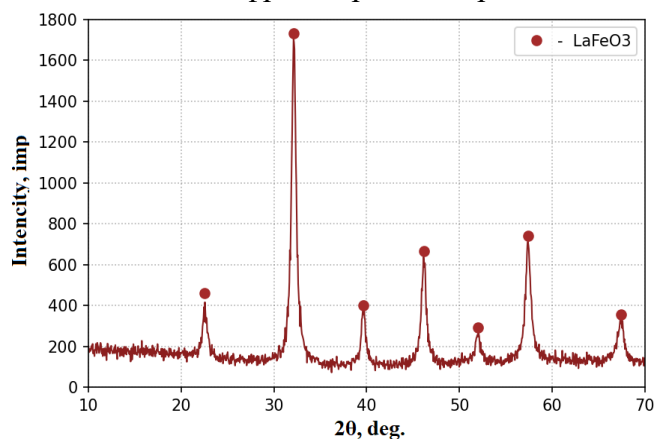
*ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»,
Университетская пл., 1, Воронеж 394018, Российская Федерация
e-mail: yaromir0202@gmail.com, тел.: +7 (960) 125-34-92*

Разработка высокочувствительных полупроводниковых сенсоров на основе сложных оксидов со структурой перовскита ABO_3 для контроля токсичных газов, таких как аммиак (NH_3), является актуальной материаловедческой задачей [1]. Ортоферрит лантана $LaFeO_3$ привлекает внимание благодаря каталитической активности и стабильности полупроводниковых свойств р-типа [2]. Направленное гетеровалентное допирование $LaFeO_3$ (например, замещение в катионной подрешетке переходными металлами) позволяет модифицировать кристаллическую структуру и существенно повысить концентрацию вакансий кислорода в анионной подрешетке, выступающих в роли центров адсорбции [3]. Целью данной работы является исследование структурных изменений и газочувствительных свойств тонких пленок твердых растворов $LaFe_{1-x}Mn_xO_3$ ($x = 0$ и $0,10$) для повышения эффективности сенсорных элементов.

Однофазные нанопорошки ортоферрита лантана $LaFeO_3$ и легированного марганцем образца $LaFe_{0,9}Mn_{0,1}O_3$ синтезированы золь-гель методом с использованием $NaOH$ в качестве осадителя с последующим отжигом при $800\text{ }^{\circ}C$ в течение 60 минут. На основании данных рентгенофазового анализа (РФА) установлено, что все образцы характеризуются орторомбической структурой перовскита (пространственная группа $Pbnm$) без посторонних примесных фаз. На рентгеновской дифрактограмме легированного образца $LaFe_{0,9}Mn_{0,1}O_3$ (рис. 2) наблюдается систематическое смещение основных дифракционных максимумов в область меньших углов 2θ по сравнению со спектром чистого $LaFeO_3$ (рис. 1) (в частности, для рефлекса (121) угол 2θ уменьшился с $32,230^{\circ}$ до $32,150^{\circ}$), что указывает на увеличение межплоскостного расстояния d_{hkl} с 2,775 до 2,784 Å. Это подтверждает успешное встраивание ионов Mn^{2+} большей величины в позиции Fe^{3+} решетки феррита лантана. Средний размер кристаллитов, оцененный по формуле Шеррера, составил 20 ± 2 нм для нелегированного оксида и $19\pm 1,9$ нм для допированного образца. Элементный состав синтезированных пленок исследован методом локального рентгеноспектрального микроанализа (ЛРСМА). Для чистого $LaFeO_3$ содержание элементов составило $La = 20,22$, $Fe = 20,16$, $O = 59,62$ ат. %, а для легированной системы – $La = 20,41$, $Mn = 1,84$, $Fe = 18,48$, $O = 59,27$ ат. %, что соответствует химической формуле $LaFe_{0,91}Mn_{0,09}O_{2,9}$ с выраженным дефицитом кислорода в анионной подрешетке [4], способствующим росту сенсорной активности. Температурные зависимости сенсорного отклика тонких пленок к парам аммиака (NH_3) в концентрации 50 ppm измерены в интервале $20\text{--}400\text{ }^{\circ}C$ и имеют максимум чувствительности при $280\text{ }^{\circ}C$ (рис. 3). Легирование марганцем привело к росту максимального отклика с 3,08 для чистого $LaFeO_3$ до 3,17 для допированного образца за счет создания дополнительных адсорбционных центров на вакансиях кислорода.



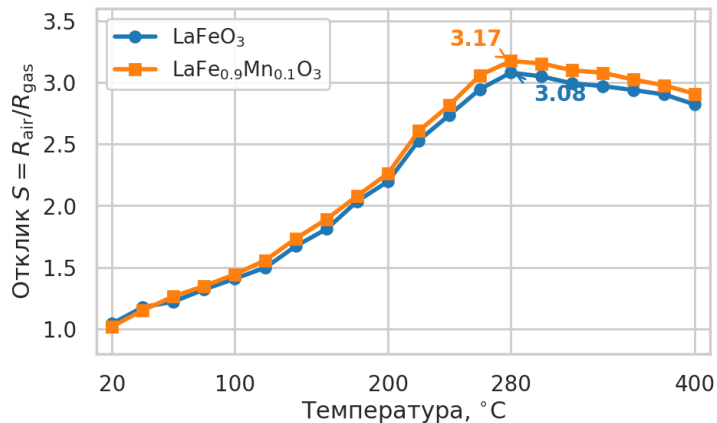
Рентгеновская дифрактограмма порошка LaFeO_3 .



Рентгеновская дифрактограмма порошка LaFeO_3 .

порошка

$\text{LaFe}_{0.9}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_3$.



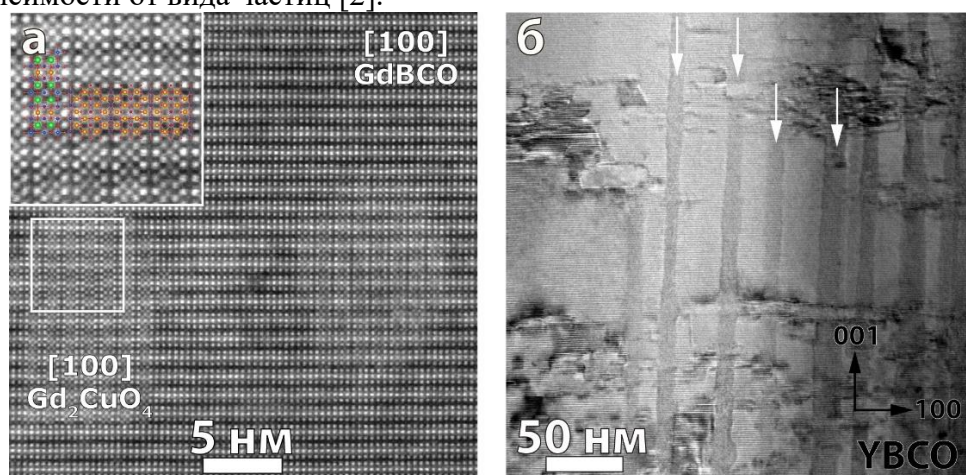
Температурная зависимость сенсорного отклика LaFeO_3 и $\text{LaFe}_{0.9}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_3$ к 50 ppm NH_3

1. Fergus J. W. Perovskite oxides for semiconductor-based gas sensors // Sensors and Actuators B. 2007. Vol. 123. P. 1169–1179. doi:10.1016/j.snb.2006.10.051
2. Toan N. N. et al. Gas sensing with semiconducting perovskite oxide LaFeO_3 // Physica B. 2003. Vol. 327. P. 279–282. doi:10.1016/S0921-4526(02)01764-7
3. Копейченко Е. И. и др. Синтез, состав и свойства феррита лантана, допированного кадмием // Неорганические материалы. 2021. Т. 57, № 4. С. 388–392.
4. Кристал М. М. и др. Сканирующая электронная микроскопия и рентгеноспектральный микроанализ. М.: Техносфера, 2009. 208 с.

Микроструктурные исследования ВТСП лент 2-го поколения с искусственными центрами пиннинга различного типаА. В. Овчаров^{а,*}, А. Л. Васильев^а, П. Н. Дегтяренко^б, И. А. Каратеев^а, М.С. Новиков^в^а НИЦ «Курчатовский институт», Москва, 123182 Россия^б ФГБУН «Объединённый институт высоких температур РАН», Москва, 125412 Россия^в «Объединённый институт ядерных исследований», Дубна, 141980 Россия*e-mail: Ovcharov_AV@nrcki.ru, +79851318511

В работе представлены результаты микроструктурных исследований методами электронной микроскопии высокотемпературных (ВТСП) лент 2-го поколения с искусственными центрами пиннинга (ИЦП) двух типов: наноразмерные включения, образующиеся в результате изменения стехиометрического состава, и дефекты, образующиеся в результате облучения лент тяжелыми ионами ^{209}Bi , ^{131}Xe и ^{84}Kr с различными энергиями и флюенсом. ВТСП ленты были получены на производственной линии компании С-инновации.

Показано, что с изменением стехиометрического состава по редкоземельному элементу в образцах образуется два вида нановключений: округлые, выстраивающиеся в длинные цепочки (Gd_2CuO_4), и уплощенные (Gd_2O_3) [1]. На образцах лент, облученных тяжелыми ионами, обнаружены вертикальные аморфные области, диаметр которых варьируется в зависимости от вида частиц [2].



ПЭМ изображения поперечных срезов ВТСП-2 ленты с ИЦП, образующимися в результате: (а) изменения стехиометрического состава редкоземельного элемента; (б) облучения тяжелыми ионами Bi.

Полученные микроструктурные данные были сопоставлены с результатами электрофизических измерений, в результате чего были определены оптимальные параметры дальнейшего масштабирования производства ВТСП лент.

Работа частично проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. Degtyarenko P.N., Ovcharov A.V., Tsvetkov A.Yu. et al. // IEEE Transactions on Applied Superconductivity. 2025. V. 35. № 4. 6604208. doi: 10.1109/TASC.2025.3564716.

2. Дегтяренко П.Н., Скуратов В.А., Васильев А.Л. и др. // ЖЭТФ. 2024. Т. 165. Вып. 6. С. 827-832. doi: 10.31857/S0044451024060099

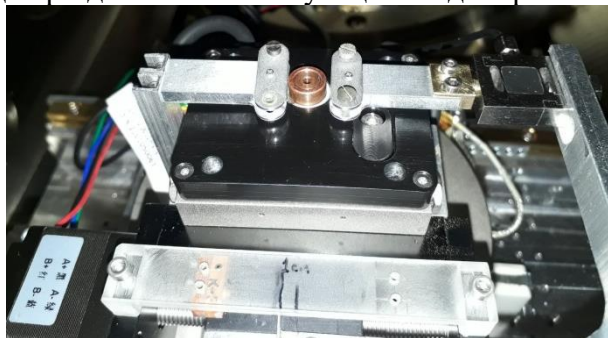
Установка для исследования *in situ* механических свойств полимерных материалов в камере растрового электронного микроскопа

Т.Д. Пацаев

*НИЦ Курчатовский институт, Москва, 123098 Россия**e-mail: timpatsaev@mail.ru*

Определение физико-механических свойств материалов – важная составляющая разработки изделий практически во всех сферах науки и техники. В частности, такие исследования необходимы при разработке полимерных матриц – основы для формирования искусственных органов и тканей, на которые высаживают культуры клеток [1]. Для проверки механических свойств материалов используются испытательные (в том числе разрывные) установки, которые предназначены для измерений зависимости напряжения в материале от деформации, что позволяет определить параметры упругости материала, исследовать процессы ползучести и релаксации, влияющие на его прочность и микроструктурные свойства [2, 3]. Для решения таких задач была разработана и создана установка для проведения механических испытаний *in situ* в камере растрового электронного микроскопа (РЭМ) Versa 3D DualBeam (Thermo Fisher Scientific) с возможностью использования режима естественной среды, который позволяет изучать различные биологические объекты, в частности клетки и ткани, а также любые не проводящие ток образцы без напыления дополнительных проводящих покрытий на их поверхность, таким образом сохраняя её естественную микроструктуру (рис. 1).

Используя эту установку, были получены изображения и, параллельно, деформационные кривые для нетканых и губчатых образцов из поли-L-лактида различной ориентации и с различными модификациями поверхностей. Также проведены анализ и визуализация изменения морфологии полимерных матриц при их частичной деградации в культуральной среде при длительной инкубации с одновременной фиксацией механических напряжений.



Установка внутри камеры РЭМ.

Работа частично проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

1. Teoh G. Z. et al. // *Minerva medica*. 2015. V. 106. P. 17-33.
2. Har-Shai Y. et al. // *Plastic and reconstructive surgery*. 1996. V. 98(1). P. 59-70. doi: 10.1097/00006534-199607000-00009
3. Ventre M., Mollica F., Netti P. A. // *Journal of biomechanics*. 2009. V. 42(4). P. 430-435. doi: 10.1016/j.jbiomech.2008.12.004

Ближний порядок и электронная структура в сплаве $\text{Fe}_{80}\text{P}_{14}\text{Si}_6$

Пермяков Н.В.¹, Потуданский Г.П.¹, Керсновский Е.С.¹, Гайворонская Е.И.¹,
Барков К.А.¹, Белоногов Е.К.^{1,2}

¹Воронежский государственный университет, Воронеж

²Воронежский государственный технический университет, Воронеж

kounplay@gmail.com

Аморфные сплавы системы Fe–P–Si это материалы с магнитными свойствами, задаваемыми спецификой ближнего порядка (локальное атомное и электронное строение). Для сплава $\text{Fe}_{80}\text{P}_{14}\text{Si}_6$ в работе [1] методами РД и ЯГР(MS) выявлен ближний порядок подрешётки Fe, но не установлена электронная структура относительно P.

В работе исследован сплав $\text{Fe}_{80}\text{P}_{14}\text{Si}_6$ до и после кристаллизации; уточнены параметры ячейки и координаты атомов. Экспериментальные параметры решётки использованы как исходные для релаксации атомных координат в рамках DFT с учётом спин-поляризации в программном пакете Quantum ESPRESSO. Новизна подхода в использовании спектра модели Fe_3P из экспериментальных данных после кристаллизации сплава $\text{Fe}_{80}\text{P}_{14}\text{Si}_6$

Локальную электронную структуру аморфного образца исследовали методом УМРЭС [2] (глубину анализа ~60 нм). Методом DFT (WIEN2k) рассчитана плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми для атомов Fe и P фазы Fe_3P , а также P $L_{2,3}$ эмиссионный спектр [3]. На рис. 1а представлены плотности электронных состояний атомов Fe и P для двух направлений спина. P 3s состояния являются локализованными и не имеют спиновой поляризации. Вблизи уровня Ферми наблюдается частичная гибридизация Fe 3d и P 3d состояний, в результате чего P 3d оболочка частично заполняется и приобретает спиновую поляризацию.

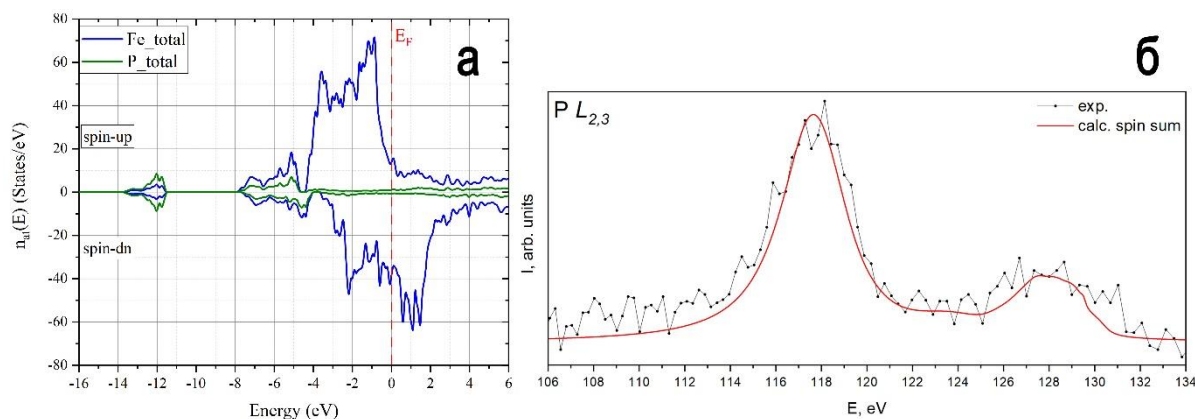


Рис. 1. Плотности электронных состояний атомов Fe и P для разных направлений спина (а); экспериментальный P $L_{2,3}$ -спектр $\text{Fe}_{80}\text{P}_{14}\text{Si}_6$ и теоретический спектр Fe_3P (б).

P $L_{2,3}$ -спектр сплава $\text{Fe}_{80}\text{P}_{14}\text{Si}_6$ (рис. 1б) имеет главный максимум в интервале 117,5 эВ (P 3s состояние) и низкоинтенсивное плечо в области 125 – 131 эВ (гибридизация P 3d и Fe 3d). Сопоставление экспериментального и теоретического спектров приводит к выводу о сходстве локальной электронной структуры аморфного $\text{Fe}_{80}\text{P}_{14}\text{Si}_6$ и Fe_3P .

1. Вавилова В.В., Ковнеристый Ю.К., Палий Н.А. // ДАН. 2000. Т. 372. № 4. С. 500.

2. V. A. Terekhov, V. M. Kashkarov, E. Yu. Manukovskii, A. V. Schukarev, E. P. Domashevskaya // J. Electron Spectros. Relat. Phenomena, v. 114–116, pp. 895–900. 2001

Кристаллизация и фазовый состав быстро закалённых лент Ti–Ni–Cu

Пермяков Н.В.¹, Белоногов Е.К.^{1,2}

¹Воронежский государственный университет, Воронеж

²Воронежский государственный технический университет, Воронеж

kounplay@gmail.com

Наиболее вероятные фазовые превращения нитинола: аустенит (B2) – упорядоченная кубическая фаза (тип CsCl) – промежуточная ромбоэдрическая (R) и орторомбический/моноклинный (B19/B19') мартенсит. Кристаллизация быстро закалённых лент Ti–Ni–Cu создаёт аустенит-мартенситную матрицу и формирует сплав с эффектом памяти формы. Легирование повышает устойчивость мартенсита [1], а кристаллизация Ti–Ni–Cu проходит без промежуточной R-фазы и с образованием интерметаллидов Cu–Ti [2].

В работе исследованы быстро закалённые ленты Ti–Ni–Cu с содержанием Ti и Cu 60 и 40 ат.% соответственно. Кристаллизацию лент проводили изотермическим отжигом в вакууме (10^{-6} Торр) при 500 и 550 °С. Фазовый состав определяли методом РФА. Было установлено, что отжиг Ti₆₀Ni₂₀Cu₂₀ при 500 °С приводит к синтезу, преимущественно, B2-фазы, а также Ti₂Ni и началу образования B19-фазы (рис. 1в, г). После 550 °С доля мартенсита возрастает и формируется набор интерметаллических фаз (Ti₂Ni, Ti₂Cu и Ti₂Cu₃).

Для Ti₅₀Ni₁₀Cu₄₀ после 500 °С характерный фазовый состав: Cu₃Ti (B11) и Cu₃Ti, а после 550 °С доля фазы Cu₃Ti увеличивается (рис. 1 а, б).

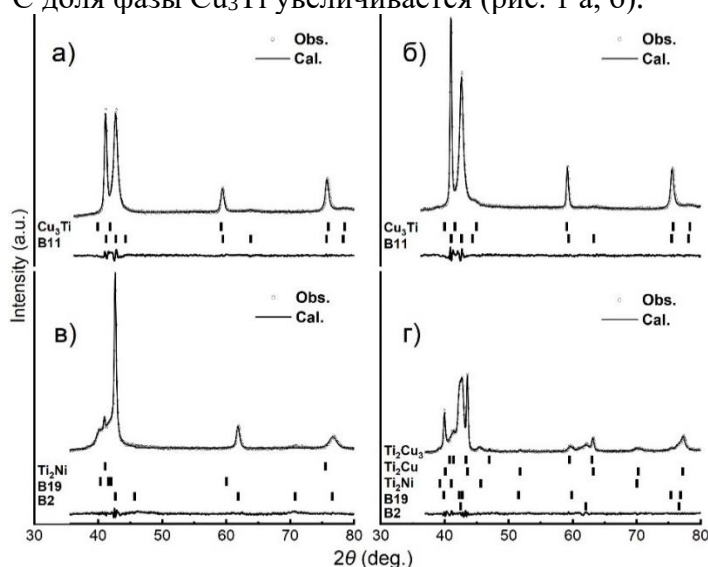


Рис. 1. Фрагменты РД лент Ti₅₀Ni₁₀Cu₄₀ (а, б) и Ti₆₀Ni₂₀Cu₂₀ (в, г) после ТО при 500 (а, в) и 550 °С (б, г).

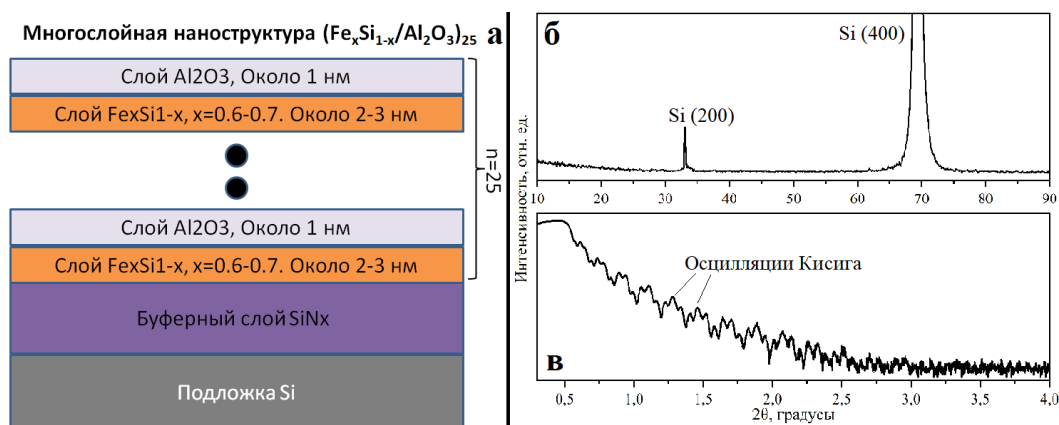
Установлено, что доля Ti выше 50 ат.% не мешает переходу B2 → B19, а легирование Cu до 40 ат.% препятствует образованию B2-фазы.

1. Ghasemi Y., Mahbadi, H., Heidary F. // Journal of Mechanical Research and Application. 2025. Vol. 15, No. 1. P. 102–117.

2. Kim M.-S., Jeon Y.-M., Im Y.-M., Lee Y.-H., Nam T.-H. // Transactions on Electrical and Electronic Materials. 2011. Vol. 12, No. 1. P. 20–23.

От CoFeB к $\text{Fe}_x\text{Si}_{1-x}$: ферромагнитный электрод для спинтроники будущегоЯ. А. Пешков^{a,*}, К. А. Барков^a, Е. И. Гайворонская^a, А. В. Ситников^b, С. А. Ивков^a^a ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия^b ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Воронеж, 394006 Россия*e-mail: tangar77@mail.ru, +79601028631

Разработка устройств спинтроники нового поколения, таких как магниторезистивная оперативная память и высокочувствительные магнитные сенсоры, требует создания ферромагнитных электродов с повышенной спиновой поляризацией на уровне Ферми. В настоящее время наиболее распространённым материалом для этих целей является аморфный сплав CoFeB, однако его спиновая поляризация составляет около 65%, что ограничивает дальнейший прогресс в величине туннельного магнетосопротивления. Перспективной альтернативой выступает аморфный нестехиометрический сплав псевдо-Гейслера $\text{Fe}_x\text{Si}_{1-x}$, который, согласно недавним исследованиям, демонстрирует спиновую поляризацию до 70% [1], превышающую показатель CoFeB. В данной работе представлены дизайн, результаты изготовления и комплексного исследования многослойных наноструктур, состоящих из ферромагнитных слоёв аморфного $\text{Fe}_x\text{Si}_{1-x}$ ($x=0.6-0.7$) и диэлектрических прослоек Al_2O_3 (рис. а). Замена стандартного электрода CoFeB на перспективный $\text{Fe}_x\text{Si}_{1-x}$ открывает возможность существенного увеличения магниторезистивного отклика, что является ключевым условием для создания устройств спинтроники с улучшенными характеристиками чувствительности и плотности записи.



Принципиальная схема многослойной наноструктуры $(\text{Fe}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Al}_2\text{O}_3)_{25}$ (а); кривая рентгеновской дифракции (б) и рентгеновской рефлектометрии (в) наноструктуры.

Рентгеновская дифракция многослойной наноструктуры демонстрирует аморфное состояние, как ферромагнитного слоя, так и диэлектрической прослойки (рис б). Кривая рентгеновской рефлектометрии (рис в) показывает формирование многослойной наноструктуры, о чем свидетельствуют осцилляции Кисига различной частоты и амплитуды.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 26-29-20055, <https://rscf.ru/project/26-29-20055/>.

[1] J. Karel, et al. Phys. Rev. Materials, 2018, 2, 064411. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.2.064411>

Исследование фазового состава тонких пленок Mo-Si методом УМРЭС

И. В. Польшин^{а,*}, Е.И. Гайворонская^а, М.И. Гайворонская^а, Е.С. Керсновский^а, А.В. Ситников^б, К.А. Барков^а

^а ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия

^б ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Воронеж, 394006 Россия

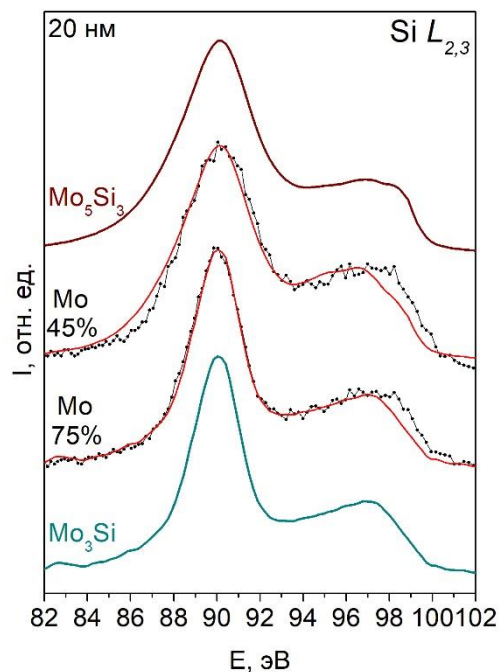
*e-mail: polshin@phys.vsu.ru, +79205638925

Тонкие пленки на основе Mo-Si являются важной частью новых сверхпроводниковых однофотонных детекторов ИК излучения дальнего диапазона [1, 2]. Наиболее эффективными для детекторов являются пленки, обладающие аморфной структурой. Отсюда вытекает основная проблема, заключающаяся в получении и контроле процесса получения данных пленок. В рамках данной работы предлагается уникальный метод Ультратонкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС), который позволяет исследовать фазовый состав пленок Mo-Si.

Пленки Mo-Si были получены методом ионно-лучевого распыления составной мишени [3] которая представляет собой пластину молибдена с кремниевыми навесками с постоянно уменьшающимся зазором между ними. Данная конфигурация позволила получить пленки Mo-Si с содержанием Mo от ~45 до 75 ат.% согласно элементному анализу, реализуемому методом EDS.

На рисунке представлены эмиссионные Si $L_{2,3}$ спектры пленок Mo-Si. По форме валентной зоны пленки с содержанием Mo ~45 ат.% можно сказать о преобладании в фазовом составе высших силицидов. На это указывает широкий главный максимум (90 эВ) и высокая интенсивность вблизи потолка валентной зоны (94–99 эВ). Компьютерное моделирование подтвердило наличие в пленке ~55% фазы Mo_5Si_3 , и ~25% фазы MoSi_2 . Помимо этого, также обнаружено формирование ~15% фазы низшего силицида Mo_3Si и ~5% SiO_2 .

При содержании Mo в пленке ~75 ат.% форма валентной зоны говорит о формировании в пленке низших силицидов. По результатам компьютерного моделирования было установлено, что в пленке формируется 100% Mo_3Si .



Эмиссионные Si $L_{2,3}$ спектры пленок Mo-Si.

1. Banerjee A. et al. Characterisation of amorphous molybdenum silicide (MoSi) superconducting thin films and nanowires //Superconductor Science and Technology. – 2017. – Т. 30. – №. 8. – С. 084010.
2. Grotowski S. et al. Optimizing the growth conditions of superconducting MoSi thin films for single photon detection //Scientific Reports. – 2025. – Т. 15. – №. 1. – С. 2438.
3. Gridnev S. A. et al. Nonlinear phenomena in nano- and microheterogeneous systems //Moscow: Binom. – 2012.

Особенности структуры и свойств мелкодисперсного никеля, сформированного из никель-цинкового сплава

И. В. Протасова*, Н.В. Брысенкова, Е.В. Ворошила

*ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия***e-mail: protasova@chem.vsu.ru, +7(4732)208538*

В работе исследован процесс получения мелкодисперсного никеля, сформированного на никелевой подложке. Мелкодисперсный никель получали из электролитического никель-цинкового сплава, нанесенного на плоскую поликристаллическую никелевую основу. Для осаждения использовали электролит состава (г/дм³) [1]: ZnSO₄•7H₂O – 57,6; NiSO₄•7H₂O – 56,2; NH₃ – 0,2 л; NH₄Cl – 27. Электролитическое покрытие получали в потенциостатическом режиме при -1,150 В, время осаждения составляло 600 с. В результате формировался биметаллический слой толщиной 4 мкм, который в дальнейшем обесцинковывался в условиях естественной аэрации в гальваностатическом режиме в 2 М NaOH. Методом сканирующей электронной микроскопии и атомно-силовой микроскопии проведена оценка изменения морфологии поверхности покрытия в процессе его обработки в гидроксиде натрия. Установлено, что в результате селективного удаления цинка из поверхностного сплава формируется слой высокодисперсного кристаллического никеля с размером частиц 40-60 нм (рис.1).

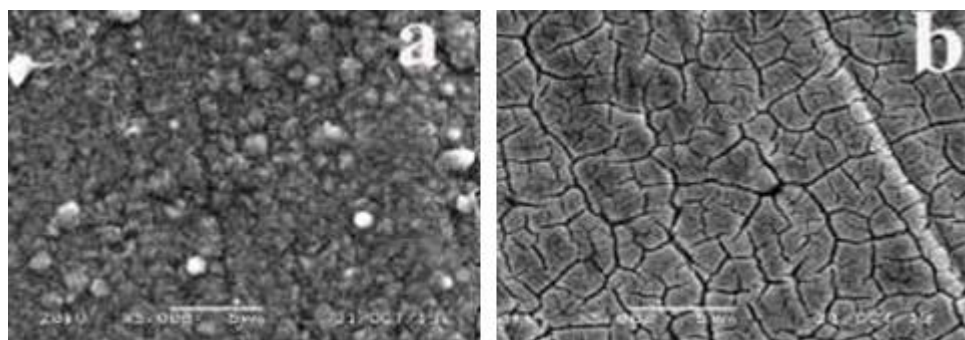


Рис.1. СЭМ изображение поверхности Ni,Zn – покрытия, осажденного при -1,150В, 600 с.: а – после осаждения и б – после обработки в 2 М NaOH.

При обработке покрытия в гидроксиде натрия происходит насыщение никелевой составляющей покрытия водородом. Оценка количества поглощенного покрытием водородом оценивали по кинетическим параметрам его ионизации из наводороженного слоя никеля [2].

Насыщение слоя дисперсного никеля водородом происходит как при растворении цинка, так и при катодной поляризации электрода с исходным и обесцинкованным покрытием. Оценка глубины проникновения водорода в подложку и количество поглощенного дисперсным никелем водорода играет существенную роль при использовании цинк-никелевых покрытий с целью защиты конструкций от коррозии.

1. Марыгина Ю.И. // Конденсированные среды и межфазные границы.— 2018.— Т. 20, № 1. — С. 93-101. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2018.20/481>

2. Сирота, Д. С., Пчельников А. П.// Защита металлов. – 2004. – Т. 40, № 1. – С. 52-54. – EDN OVYGGX.

Синтез нанопорошка алюмомагниевого шпинели методом совместного осаждения для получения прозрачной керамики

Рогова А.Н., Коломиец Т.Ю., Солнцев К.А.

Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова
Российской академии наук
Email: ralenka12@gmail.com

Перспективность применения керамики на основе алюмомагниевого шпинели (АМШ) доказана многочисленными исследованиями, подтверждающими ее конкурентные эксплуатационные характеристики [1]. Высокие коэффициенты преломления и светопропускания, твердость, прочность, термическая и химическая стойкости, а также широкая доступность и дешевизна сырьевых компонентов делают АМШ незаменимым материалом для изготовления оптически прозрачных окон, обтекателей, брони и некоторых прозрачных огнеупоров [2]. Технология производства такой керамики широко изучена, однако конечные свойства изделий зависят от характеристик и качества используемых порошков АМШ и методов их синтеза.

Целью данной работы являлся получение высокочистого прекурсора АМШ стехиометрического состава методом совместного осаждения для дальнейшего синтеза прозрачной керамики.

В качестве исходных компонентов были выбраны водные растворы хлорида магния и хлорида алюминия. В качестве осадителя использовали водный раствор гидрокарбоната аммония в тройном избытке в смеси с гидроксидом аммония. рН используемого раствора поддерживали в интервале 8-11. Подачу реагентов осуществляли с помощью перистальтического насоса со скоростью подачи не выше 20 мл/мин. В процессе совместного осаждения добавляли высокомолекулярный поверхностно-активный полимер.

Синтез проводили при комнатной температуре. Полученный осадок выдерживали в вязкой среде осаждения, после чего отфильтровывали, промывали дистиллированной водой и спиртом и высушивали на воздухе.

В результате синтеза получали слабо кристаллический осадок. Единственной детектируемой РФА фазой являлся $\text{NH}_4\text{Al}(\text{OH})_2\text{CO}_3$, магнийсодержащее соединение выделялось в рентгеноаморфном виде. Удельная поверхность выделенных осадков составляла 477 – 600 м²/г в зависимости от параметров эксперимента.

Дифференциальный термический анализ полученного прекурсора позволил выявить оптимальные температуры формирования алюмомагниевого шпинели. Установлено, что фаза АМШ начинает образовываться с 820 до 900 °С и позволяет получить порошок с размером частиц порядка 20 нм. Последующее увеличение температуры синтеза до 1000 °С выявило склонность частиц к образованию конгломератов и, следовательно, снижению удельной поверхности частиц до 127 м²/г.

Установлено, что добавление высокомолекулярного ПАВ также позволило замедлить рост кристаллов и агломерацию наночастиц прекурсора в процессе осаждения и последующей термообработки, а также повысить активность наночастиц к спеканию и существенно понизить температуру синтеза порошка шпинели.

1. Volfi A. et al. Industrial potential of additive manufacturing of transparent ceramics: A review// Open ceramics. 2024. V. 20. P. 100682.

2. Gajdowski C. et al. Mechanical and optical properties of MgAl_2O_4 ceramics and ballistic efficiency of spinel based armour // Ceramics International. 2022. V. 48. I. 13. P. 18199-18211.

Квантово-химическое моделирование адсорбции атомарного водорода на тонких пленках тяжелых металлов

А. В. Романов

Воронежский государственный университет

Поведение атомарного водорода на поверхности переходных металлов играет значимую роль во многих технологических процессах. В этом направлении выполнено большое количество экспериментальных исследований, однако число квантово-химических расчетов не столь велико.

Целью данной работы является установление характеристик адсорбции атомарного водорода на монокристаллических низкоиндексных гранях платины, иридия и золота в рамках единой математической модели на основе теории функционала электронной плотности. Для всех систем выполнено сканирование поверхности потенциальной энергии, определены минимумы и переходные состояния. Установлено, что поверхность потенциальной энергии для платины, иридия и золота существенно отличается от таковой для переходных металлов четвертого и пятого периодов. На поверхности (111) присутствует дополнительный ярко выраженный минимум в положении top. На грани (100) наиболее выгодным является положение bridge, тогда как top и hollow — переходные состояния, а для грани (110) наиболее стабильными оказываются положения top и short bridge, тогда как hollow и long bridge — переходные состояния.

Таким образом, существенное различие в электронном строении атомов металлов шестого периода (релятивистские эффекты, а также более выраженные эффекты экранирования и проникновения) существенно меняет характер адсорбции атомарного водорода на тяжелых металлах шестого периода в сравнении с более легкими представителями четвертого и пятого периодов.

¹Е.В. Руднев*, ¹М.А. Никонов, ²Ю.Н. Власов¹ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»,
Университетская пл., 1, Воронеж 394018, Российская Федерация²ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет инженерных технологий»,
пр. Революции, 19, Воронеж 394036, Российская Федерация*e-mail : rudneff@mail.ru, +79529590440

Целью работы является получение тонких плёнок в системе Ag-S-O и исследование их структуры, состава и оптических свойств в зависимости от температуры сульфидизации металлического серебра.

Актуальность исследования определяется уникальными свойствами гетерокомпозиции сульфида-оксида серебра. Сульфид Ag_2S является суперионным проводником с удивительной пластичностью, что используется в биосенсорике и катализе. Высший оксид Ag_2O_3 содержит серебро в степени окисления Ag^{3+} , что вместе с особенностями кристаллической и электронной структуры создаёт предпосылки для проявления высокой каталитической активности в окислительно-восстановительных реакциях [1, 2].

Экспериментальные результаты данной работы получены с использованием методов рентгено-спектрального микроанализа, рентгеновской дифракции и оптической спектроскопии при изучении фазового состава тонких плёнок, сформированных на поверхности кремния Si(400) отжигом слоя металлического серебра толщиной 1 мкм в парах серы в интервале температур от 150 до 400°C.

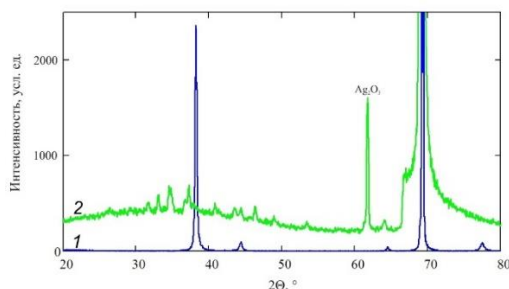


Рис.1. Дифрактограммы образцов Ag/Si (линия 1) и Ag_2S - Ag_2O_3 /Si (линия 2).

Обнаружена метастабильная фаза Ag_2O_3 (пики рентгеновской дифракции при $2\theta = 61,77^\circ$; $33,04^\circ$; $27,77^\circ$). Элементный состав указывает на преимущественное содержание в плёнке сульфида с примесью оксида. Определённые по оптическим исследованиям ширины запрещённой зоны (0,99 эВ и 1,38 эВ) соответствуют моноклинному сульфиду $\alpha\text{-Ag}_2\text{S}$ и упорядоченной кубической фазе Ag_2S , сходной по кристаллической структуре с кубическим Ag_2O_3 . Сосуществование двух полиморфных модификаций Ag_2S предположительно обуславливает топотактическое превращение при окислении кислородом воздуха.

Таким образом показана принципиальная возможность синтеза за счёт эпитаксиальной стабилизации перспективного функционального материала Ag_2S - Ag_2O_3 для катализа и химических источников тока.

[1] Nawaf, A. T. et al. A Novel Synthetic Nano-Catalyst (Ag_2O_3 /Zeolite) for High Quality of Light Naphtha by Batch Oxidative Desulfurization Reactor. *BCREC* 16 (4), 716-732 (2021). <https://doi.org/10.9767/bcrec.16.4.11383.716-732>

[2] Ando, S. et al. Ag_2O_3 clathrate is a novel and effective antimicrobial agent. *J Mater Sci* 47, 2928–2931 (2012). <https://doi.org/10.1007/s10853-011-6125-0>

Поверхностные и объёмные механизмы переноса кислорода в магнетите Fe_3O_4

Г.С. Савин¹, В.А. Бородин^{1,2}

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

²НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

E-mail: savin.gleb.mephi@yandex.ru

Формирование защитных оксидных слоёв на поверхности ферритно-мартенситных сталей является одним из способов повышения их коррозионной стойкости в кислородсодержащих агрессивных средах. Во многих случаях внешний слой такого оксида представляет собой магнетит Fe_3O_4 , поэтому для описания роста и эволюции оксидной плёнки важно понимать, каким образом кислород захватывается внешней поверхностью магнетита и переносится через его объём. Представляет интерес выявление закономерностей поверхностного захвата кислорода из окружающей среды и проникновения захваченного на поверхности кислорода в объём оксида.

В настоящей работе проведено моделирование отдельных стадий переноса кислорода в магнетите: диссоциация молекулярного кислорода на поверхности Fe_3O_4 , образование поверхностных кислородных конфигураций, формирование подповерхностных кислородных межузельных атомов и их переход в объём кристалла. Расчёты проводились методами молекулярной динамики и молекулярной статистики, реализованными в программном пакете LAMMPS [1]. Для описания межатомных взаимодействий использовался модифицированный потенциал ReaxFF [2] с усиленным отталкиванием между атомами железа и кислорода на малых межатомных расстояниях.

Рассматривались две возможные конфигурации поверхности $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$, отличающиеся расположением атомов в приповерхностном слое. Установлено, что поверхность, содержащая атомы железа в тетраэдрических позициях, эффективно захватывает молекулы кислорода из газовой среды, вызывая их диссоциацию на отдельные атомы. Для такой поверхности характерна анизотропная миграция адатомов кислорода, при которой наиболее часто реализуются короткие переходы между соседними устойчивыми положениями. Напротив, на поверхности с атомами железа в октаэдрических узлах молекулы кислорода захватываются заметно реже, одиночные адатомы кислорода оказываются существенно менее подвижными, а барьеры их поверхностной миграции превышают 1,5 эВ.

При достаточно высокой концентрации газообразного кислорода у поверхности Fe_3O_4 возможно образование не только отдельных адатомов кислорода, но и более сложных приповерхностных конфигураций. Расчёты показывают, что массовое осаждение кислорода сопровождается перестройкой ближайших к поверхности атомных слоёв магнетита и формированием гантельных межузельных конфигураций кислорода. Для перехода такой конфигурации из приповерхностной области вглубь кристалла получен энергетический барьер порядка 2 эВ.

В объёме Fe_3O_4 межузельный кислород может существовать в виде устойчивой гантельной конфигурации, ориентированной вдоль направления $\langle 110 \rangle$. Такая конфигурация похожа на гантельные межузлия, формирующиеся в приповерхностной области при насыщении поверхности кислородом.

1. Plimpton S. // J. Comp. Phys. – 1995. – V. 117. – P. 1–19.
2. Pitman M.C., van Duin A.C.T. // J. Am. Chem. Soc. – 2012 – V. 134 – P. 3042 – 3053.

Влияние покрытия на структуру и механические свойства низкомодульного биосовместимого сплава Ti–Zr–Nb

Сергиенко К.В.¹, Севостьянова Т.М.²

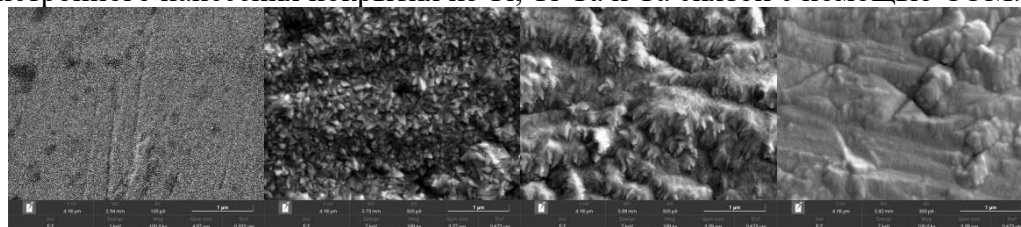
¹Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва, Россия

²Национальный медико-хирургический Центр имени Н.И. Пирогова Министерства здравоохранения Российской Федерации, Москва, Россия

*shulf@yandex.ru

Исследования материалов для имплантата тазобедренного сустава сместили акцент на β -титановые сплавы благодаря низкому модулю Юнга [1]. Сплавы группы Ti-Zr-Nb демонстрирует перспективность [2]. В данной работе представлены результаты исследования структуры сплавов Ti-38Zr-(9, 11, 13)Nb с нанесенными функциональными покрытиями из Ti, Ta и комбинированного покрытия Ti-Ta.

На рисунке 1 представлен пример поверхности пластин сплава Ti-38Zr-9Nb до и после магнетронного нанесения покрытия из Ti, Ti-Ta и Ta снятой с помощью СЭМ.



а) б) в) г)

Рисунок 1. а – полированная пластина Ti-38Zr-9Nb перед магнетронным напылением, б – пластина Ti@Ti-38Zr-9Nb, в – пластина Ti-Ta@Ti-38Zr-9Nb, пластина Ta@Ti-38Zr-9Nb

Анализ микрофотографий магнетронного покрытия из Ti, Ti-Ta и Ta на подложке из сплавов Ti-38Zr-(9, 11, 13)Nb показывает формирование характерной плотной колоннообразной структуры, типичной для осаждения в условиях ограниченной поверхностной диффузии атомов. На представленных микрофотографиях видны вытянутые столбчатые зерна, ориентированные преимущественно перпендикулярно поверхности подложки, что указывает на стабильный направленный рост в ходе процесса магнетронного распыления. Межколонное пространство отсутствует, границы между столбцами выражены слабо. Морфология покрытия соответствует компактному низкотемпературному росту. Следует отметить различие самих колон при напылении Ti, Ti-Ta и Ta: покрытие из Ti имеет острые, трехгранные пирамидоподобные колонны с плоскими гранями и острыми углами. При напылении Ta колонны имеют более сглаженный вид. Покрытие из Ti-Ta представляет собой промежуточный вид между покрытием из Ti и Ta – колонны имеют «ёлочную», сглаженную форму, при этом видны достаточно острые вершины этих колонн.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-13-00186, <https://rscf.ru/project/24-13-00186/>.

1. Chen L.Y., Cui Y.W., Zhang L.C. Recent development in beta titanium alloys for biomedical applications // Metals. 2020. V. 10. Is. 9. Art. N 1139. DOI: 10.3390/met10091139
2. Sergienko, K. V., Konushkin, S. V., Kaplan, M. A., Gorbenko, A. D., Guo, Y., Nasakina, E. O., Sudarchikova, M. A., Sevostyanova, T. M., Morozova, Y. A., Shatova, L. A., Mikhlik, S. A., Sevostyanov, M. A., & Kolmakov, A. G.. Physical and Mechanical Properties of Ti-Zr-Nb Alloys for Medical Use // Metals, 2024, Vol. 14, No. 1311, DOI: 10.3390/met14111311.

Фазовые переходы в сплаве Гейслера $\text{Ni}_{2,14}\text{Mn}_{0,81}\text{Fe}_{0,05}\text{Ga}$ при воздействии внешнего магнитного поля и гидростатического давления

П.С. Смерчанский^{1,2}, В.В. Коледов¹, А.П. Каманцев¹, Д.Д. Кузнецов¹,
О.Е. Ковалев³, Р.А. Сафонов³, И.Ф. Грибанов³, А.В. Головчан³,
Н.Ю. Ныркoв³, С.С. Жданов^{4,1}, В.М. Поварницын^{4,1}

¹ *Институт радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова РАН, 125009, Москва, Россия*

e-mail: victor_koledov@mail.ru

² *Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», 109028, Москва, Россия*

e-mail: pavelsmerchanskiy@gmail.com

³ *Донецкий физико-технический институт им. А.А.Галкина, 283048, Донецк, Россия*

⁴ *Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, 105005, Москва, Россия*

Сплавы Гейслера семейства Ni_2MnX , где $X = \text{Ga}, \text{In}, \text{Sn}...$, которые, как было доказано, обладают гигантским магнитокалорическим эффектом (МКЭ) и магнитоуправляемым эффектом памяти формы благодаря термоупругому магнитоструктурному фазовому переходу (МФП), продолжают привлекать внимание. К сожалению, эти прорывные функции выполняются в сильных магнитных полях, по крайней мере, в несколько Тесла. В настоящее время ведется активный поиск сплавов, в которых эти эффекты могли бы проявляться в полях, не превышающих те, которые генерируются постоянными магнитами. Точное измерение и теоретический расчёт влияния многокомпонентного легирования на объемную постоянную магнитострикции B могут стать основой для разработки новых многофункциональных сплавов Гейслера. Термодинамическая теория показывает, что B может определять как чувствительность МФП к внешнему полю, так и знак МКЭ.

В данной работе исследовано влияние магнитного поля и внешнего гидростатического давления на МФП в сплаве Гейслера $\text{Ni}_{2,14}\text{Mn}_{0,81}\text{Fe}_{0,05}\text{Ga}$ с прямым МКЭ. Обнаружено, что магнитное поле повышает температуру МФП, а гидростатическое сжатие увеличивает намагниченность в точке Кюри, незначительно влияя на ее положение. Термодинамическая модель, основанная на разложении Ландау, корректно описывает экспериментальные данные с учетом объемной постоянной магнитострикции B .

[1] Jiang S., Yang K. Review of high-throughput computational design of Heusler alloys // Journal of Alloys and Compounds. – 2021. – Т. 867. – С. 158854.

[2] Liu J. et al. Reversible low-field magnetocaloric effect in Ni-Mn-In-based Heusler alloys // Physical Review Materials. – 2019. – Т. 3. – №. 8. – С. 084409.

[3] Shavrov V.G. et al. Phase Transformations and the Magnetocaloric Effect in Heusler Alloys of the Family $\text{Ni}_{51-x}\text{Mn}_{33.4}\text{In}_{15.6}\text{V}_x$ // Physics of Metals and Metallography. – 2024. – Т. 125. – №. 14. – С. 1927-1934.

[4] Kojima T., Kameoka S., Tsai A.P. The emergence of Heusler alloy catalysts // Science and Technology of Advanced Materials. – 2019. – Т. 20. – №. 1. – С. 445-455.

[5] Krenke T. et al. Ferromagnetism in the austenitic and martensitic states of Ni-Mn-In alloys // Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics. – 2006. – Т. 73. – №. 17. – С. 174413

Изготовление керамики на основе сульфатов стронция и бария со сложной геометрией методом стереолитографии

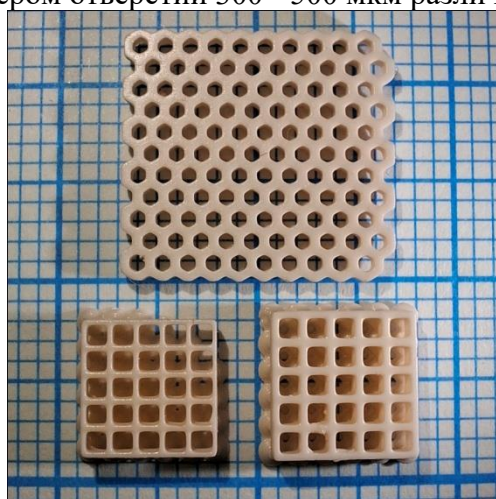
П. С. Соколов^{а,*}, А. В. Захарова^а, А. М. Сергеев^а, Л. В. Ермакова^а

^а *Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, 123182 Россия*

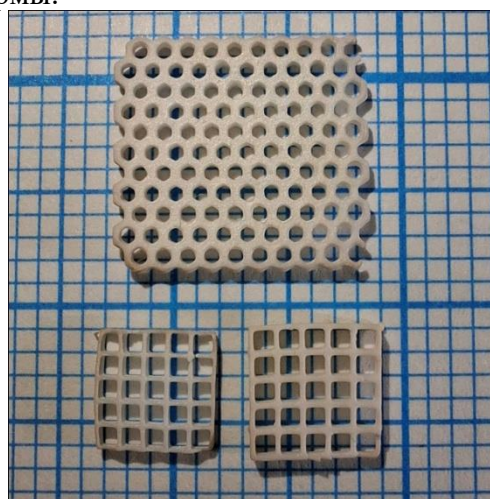
**e-mail: sokolov_ps@nrcki.ru, sokolov-petr@yandex.ru*

Плотная керамика на основе сульфатов щелочноземельных металлов обладает особым комплексом низких температуростабильных диэлектрических характеристик [1], что может быть перспективно для создания антенн сложной формы для связи в миллиметровом диапазоне длин волн в том числе и с помощью методов трехмерной печати [2,3]. Из всех широкодоступных на практике аддитивных методов именно стереолитография обладает наилучшим разрешением печати разнообразных функциональных и конструкционных материалов [3,4].

В настоящей работе низковязкие (менее 3 Па·с) высоконаполненные (до 55 об.%) фотоотверждаемые суспензии на основе коммерчески доступных порошков сульфата бария (стронция) и 1,6-гександиол диакрилата, подходящие для стереолитографической 3D печати были разработаны и успешно апробированы для изготовления планарных переодических структур сложной формы с мелкими деталями [3], с тонкими стенками (перегородками) размером отверстий 300 - 500 мкм различной формы.



(а)



(б)

Композиты, полученные DLP 3D печатью из фотоотверждаемой суспензии на основе BaSO₄ (а) и керамика после пиролиза и спекания при 850 °С (б) [3].

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ «Курчатовский институт». Аналитические исследования проведены с использованием научного оборудования ЦКП «Исследовательский химико-аналитический центр НИЦ Курчатовский институт».

1. Jia Y.Q., // J. Am. Ceram. Soc. 2022. V. 106. P. 1250–1259. doi: 10.1111/jace.18862
2. Jenkel K.D., // J. Am. Ceram. Soc. 2023. V. 107. P. 2494–2503. doi: 10.1111/jace.19597
3. Ермакова Л.В., // Физика и химия стекла. 2025. Т. 51. С. 248–256. doi: 10.31857/S0132665125020078
4. Сергеев А.М., // Материаловедение. 2026. № 6. С. 33-40. doi: 10.31044/1684-579X-2026-0-6-33-40

Фазовый состав нанопластин SiC, полученных стримерным разрядом в SiC(4H).

С.А. Солдатенко^{✉1} В.О. Текутьева²

¹ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет»,
ул. 20-летия Октября, 84, Воронеж 394006, Россия

²ВУНЦ ВВС «Военно-воздушная академия им. профессора Н.Е. Жуковского
и Ю.А. Гагарина», ул. Старых Большевиков, 54а, Воронеж 394064, Россия

cossack408@mail.ru

Методами ДБЭ и ПЭМ проведен анализ фазового состава и структуры нанопластин SiC, полученных в результате стримерного разряда в монокристалле SiC(4H) [1]. Идентифицированы нанопластины фазы SiC структурного типа B20 и пакеты нанопластин гексагональной фазы SiC (4H). Предложен возможный механизм образования нанопластин SiC в стримерном разряде.

Анализ изображений и картины микродифракции показал, что по периферии частицы микронного размера распределены нанопластины фазы SiC структурного типа B20 с параметром решетки $a = 0,45 \pm 0,01$ нм. Латеральные размеры нанопластин этой фазы составляют около 20 – 100 нм. Для этих пластин характерна кристаллографическая огранка. Большинство из них ориентированы по оси $\langle 111 \rangle$ вдоль электронного пучка.

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

Как известно, стримерный разряд, распространяющийся по плазменным каналам (диаметром около 1 мкм) вдоль плоскостей псевдоспайности (0001) SiC(4H) приводит к инверсной населенности зоны проводимости. Согласно оценке, концентрация неравновесных носителей может достигать значения $n = 6 \cdot 10^{24}$ м⁻³ [2], что переводит большинство молекулярных орбиталей кристалла в разрыхляющее состояние. В результате локально (в последовательности слоев кубической фазы) возможен бездиффузионный фазовый переход от фазы β -SiC с sp^3 -гибридизацией к метастабильной фазе SiC (B20) с другим типом гибридизации и меньшей степенью поляризации. Переход β -SiC $\rightarrow$ SiC (B20) может осуществляется путем взаимного разворота кремниевой и углеродной подрешетки β -SiC по оси $\langle 111 \rangle$ (синхронизированный перескок атомов углерода в октаэдрические пустоты кремниевой подрешетки), сопровождающийся увеличением объема. Возникающая ударная акустическая волна вызывает раскалывание кристалла по 4H-SiC по плоскостям спайности $\{10\bar{1}0\}$ и псевдоспайности (0001).

1. Патент RU218008U1 Нанореактор получения 2d карбида кремния в стримерном разряде // И.И. Долгих, Д.А. Жукалин, Л.А. Битюцкая // 2023-05-02

2. Н.И. Кускова Искровые разряды в конденсированных средах // Журнал технической физики, 2001, том 71, вып. 2, С.52-54

Оптические свойства тонких полупроводниковых пленок MoS₂

Станчик А.В.^{1,2}, Гременок В.Ф.^{1,2}, Петросян С.Г.³, Хачатрян А.М.³

¹ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению»

stanchik@physics.by

²Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

³Институт Радиофизики и Электроники НАН Армении

Соединение MoS₂ привлекает большое внимание благодаря своей слоистой структуре, уникальным электронным и оптоэлектронным свойствам для создания фототранзисторов, фотодетекторов, сенсоров и логических схем. Для синтеза MoS₂ используются различные методы: механическое и химическое расслоение, химическое осаждение из газовой фазы и т.д. Однако точный контроль толщины, дефектности и однородности структуры получаемых пленок на больших подложках все еще остается серьезной проблемой. Целью работы является исследование оптических свойств пленок MoS₂, полученных на стеклянных подложках импульсным лазерным осаждением (ИЛО).

Установлено, что с увеличением толщины пленок MoS₂ их коэффициент отражения закономерно снижается в отличие от коэффициента пропускания во всем исследуемом диапазоне длин волн (рис. 1). Для пленок толщиной 60 и 90 нм (образцы 2 и 1, соответственно) наблюдается высокое пропускание, которое плавно растет с увеличением длины волны, достигая 87–96% в ИК-области, при этом их отражение остается низким (менее 30%). Пленки толщиной 500 нм (образец 3) характеризуются резким падением пропускания в видимой области, что указывает на сильное фундаментальное поглощение, однако в ближней ИК-области их пропускание интенсивно растет до 83%.

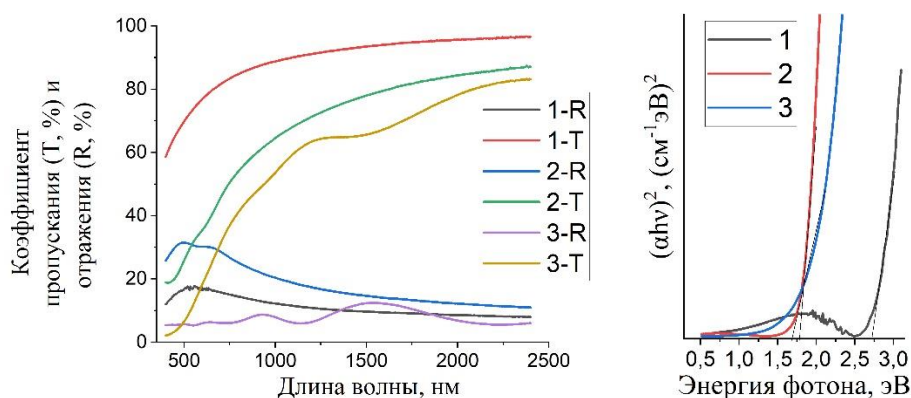


Рис. 1. Спектры пропускания и отражения, а также зависимости Таука для пленок MoS₂

Для пленки толщиной 60 нм (образец 2) ширина запрещенной зоны (E_g) составляет ~1.7 эВ, для пленки толщиной 500 нм (образец 3) она незначительно выше – ~1.8 эВ, в то время как для образца толщиной 90 нм (образец 1) наблюдается резкий сдвиг до значения порядка ~2.7 эВ. Такое сильное увеличение E_g может быть обусловлено изменением фазового состава (модификации), формированием оксидных фаз или присутствием сильных механических напряжений на границе с подложкой.

Таким образом, методом ИЛО получены пленки MoS₂ толщиной 60, 90 и 500 нм, проявляющие прямозонный характер с E_g в диапазоне 1.7–2.7 эВ. Исследование демонстрирует возможность синтеза относительно толстых пленок MoS₂, потенциально способных сохранять оптоэлектронные характеристики ультратонких слоев MoS₂.

Работа выполнена в рамках проекта БРФФИ (№ T24КИТГ-013) и ГПНИ «Современное материаловедение, перспективные материалы и новые технологии» (2026–2030 гг.)

Газочувствительные свойства нанопорошков LaCoO_3 легированных ионами Ni^{2+} полученных цитратным методом

А. А. Суркова^{а,*}, В. А. Костина^а

^а *ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018
Россия*

**e-mail: anastasiasurok@gmail.com, +79204469358*

В работе исследованы газочувствительные свойства кобальтита лантана LaCoO_3 с 0, 5 и 15% Ni со структурой перовскита полученные цитратным методом. Методика синтеза включала в себя растворение кристаллогидратов нитратов лантана (+3), кобальта (+3) и никеля (+2), затем при постоянном нагревании (60-80°C) и перемешивании осаждается гидроксидом аммония NH_4OH , через 5 минут добавляется лимонная кислота до образования сложного комплекса, а затем сжигается на воздухе. Полученная сажа и пепел отжигается при температуре 750°C в течении 4 часов.

Методом рентгенофазового анализа было подтверждено образование кобальтита лантана со структурой перовскита с замещением ионами никеля (2+) ионов кобальта (3+), что привело к образованию побочной фазы – смешанного оксида кобальта (2+, 3+). Методами Вильямсона-Холла и Шеррера были рассчитаны размеры кристаллитов от 39 до 53 нм со степенью дефектности менее 0,002, что свидетельствует о высокой кристалличности.

Локальный рентгеноспектральный микроанализ выявил наличие кислородных вакансий, которые благоприятно влияют на электронный тип проводимости.

Метод Ван дер Пау использовался для измерения удельного поверхностного сопротивления для пленок из кобальтита лантана легированных никелем на 0, 5 и 15%. В присутствии угарного газа CO (50 ppm) абсолютный газочувствительный отклик, рассчитанный как отношение сопротивления на воздухе к сопротивлению в присутствии исследуемого газа, составляет 1,8 при температуре 180°C для образца с максимальной степенью легирования никелем 15%. Относительное значение сенсорного отклика в присутствии угарного газа достигает 44,6%.

Пленки кобальтита лантана в присутствии паров аммиака NH_3 (50 ppm) также реагируют с изменением удельного поверхностного сопротивления. Абсолютный газочувствительный отклик проявляется при температуре 225°C и составляет 1,83. Максимальный относительный отклик 45,5% соответствует максимальной степени легирования 15%

LaCoO_3 с 15% Ni меняет удельное поверхностное сопротивление в присутствии угарного газа и паров аммиака при разных температурах, что свидетельствует о селективности датчиков на его основе.

П. П. Тараканов*, Ф. А. Вдовенков, О. А. Козадеров

*ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия***e-mail: tarakanov.pavlik2015@yandex.ru*

Морфологически неоднородные электродные материалы широко используются в электрохимическом материаловедении. Перспективным является синтез металлических покрытий с различной шероховатостью. Например, гальванические медные покрытия сложной геометрической конфигурации могут быть использованы в микроэлектронике и особую роль играют в сенсорике, основанной на реакциях катодного восстановления нитрат-иона [1] и углекислого газа [2]. Для корректного сопоставления кинетических параметров электрохимического процесса различных металлических систем требуется корректно учитывать площадь изменяющегося во времени фронта диффузии электрохимически активного компонента. Для этого необходимы данные как об интегральных (фактор шероховатости), так и о локальных (средняя шероховатость, расстояние между соседними неровностями) параметрах морфологии поверхности [3].

Металлические электродные материалы с варьируемой шероховатостью получали гальваническим осаждением из подкисленного раствора сульфата меди (II) и растворов на его основе с добавлением различных добавок: кватернизированный поливинилпиридин 300000 г/моль; полиэтиленгликоль 300 г/моль; полиэтиленгликоль 1500 г/моль; а также комплекс добавок: полиэтиленгликоль 4000 г/моль, динатриевая соль 4,4-дитиобензолдисульфоновой кислоты, 2-аминобензотиазол.

Для измерения параметров шероховатости использовали комбинацию физико-химических методов. Локальные характеристики морфологии медных покрытий определяли методом атомно-силовой микроскопии (АСМ). При переходе от покрытия, полученного из раствора без добавок, к покрытию, полученному из раствора с комплексом органических добавок, средняя шероховатость снижается примерно в 5 раз (с 120 ± 40 до 25 ± 2 нм). Расстояние между соседними неровностями меняется не систематически и принимает значения порядка 10^{-6} м. Метод АСМ позволяет определить геометрические параметры, найденные только в пределах зондового сканирования, поэтому для определения макрогеометрических характеристик – истинной площади поверхности и фактора шероховатости электрода в целом – использовали иной подход, основанный на электроосаждении монослоя свинца при недонапряжении. Данный метод чувствителен к кристаллической структуре покрытий, которую определяли методом рентгеноструктурного анализа (РСА), что позволило выявить перераспределение долей кристаллографических граней при введении добавок в сульфатный электролит меднения. С учётом данных РСА установлено, что фактор шероховатости покрытий лежит в диапазоне от 1.99 до 3.47.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2025-2027 годы, проект № FZGU-2025-0001.

1. Kozaderov O. // *Electrochem.* – 2026. – V. 7, № 2. – P. 16. doi: 10.3390/electrochem7020016.
2. Chen L. // *ACS Catal.* 2023. V. 13, № 18. P. 11934–11944. doi: 10.1021/acscatal.3c01815.
3. Вдовенков Ф.А. // *Конденсированные среды и межфазные границы.* 2025. Т. 27, № 4. С. 592-605. doi: 10.17308/kcmf.2025.27/13297.

Диэлектрические свойства оксида графена синтезированного методом электрохимического окисления

Набаа Хави Хасан, Махди А. Мохаммед, Фирас Мохаммед Дашур Аль-Джаафари
Физический факультет, научный колледж, Университет Васит, Аль-Кут, Ирак
*e-mail: mahmed@uowasit.edu.iq

Dielectric Properties of Synthesized Graphene Oxide by Electrochemical Oxidation Method

Nabaa Hawi Hassan¹, Mahdi A. Mohammed^{1,*}, Firas Mohammed Dashoor Al-jaafari¹

¹ Department of Physics, College of Science, Wasit University, Al Kut, Iraq.

*Corresponding author: mahmed@uowasit.edu.iq

Abstract: Graphene oxide (GO) was synthesized using the electrochemical oxidation method. Unlike graphite, the results show that the dielectric permittivity and loss tangent of GO increase at a specific temperature (the Curie temperature) and then decrease rapidly with increasing temperature. The Curie temperature shifts with increasing frequency.

Оксид графена (ГО) синтезирован методом электрохимического окисления. В отличие от графита результаты показывают, что диэлектрическая проницаемость и тангенс угла потерь ГО увеличиваются при определенной температуре (температуре Кюри), а затем быстро уменьшаются с увеличением температуры, температура Кюри зависит от частоты.

Высокая диэлектрическая проницаемость характерна для керамических материалов, например, титанат бария [1], [2]. Однако, высокие величины тангенса угла диэлектрических потерь и их зависимость от частоты не идеально для использования в конденсаторах [3], [4]. Эффект Максвелла - Вагнера – Силларса, приводящий к поляризации в неоднородных материалах, затрудняет синтез материала с высокой диэлектрической проницаемостью при низком тангенсе угла потерь. Оксид графита способен генерировать химически модифицированные слои графена, известные как функционализированный графен. Окисление поверхности графена и его большое аспектное соотношение увеличивают диэлектрическую проницаемость без увеличения диэлектрических потерь [5].

На рис. 1 показаны температурные зависимости ϵ и $\tan \gamma$ ГО. Величины ϵ и $\tan \gamma$ растут с повышением температуры вплоть до температуры Кюри (T_C). При T_C диэлектрическая проницаемость составляет 33,4, 37,4 и 45,5 при частотах 100, 500 и 1000 кГц, соответственно.

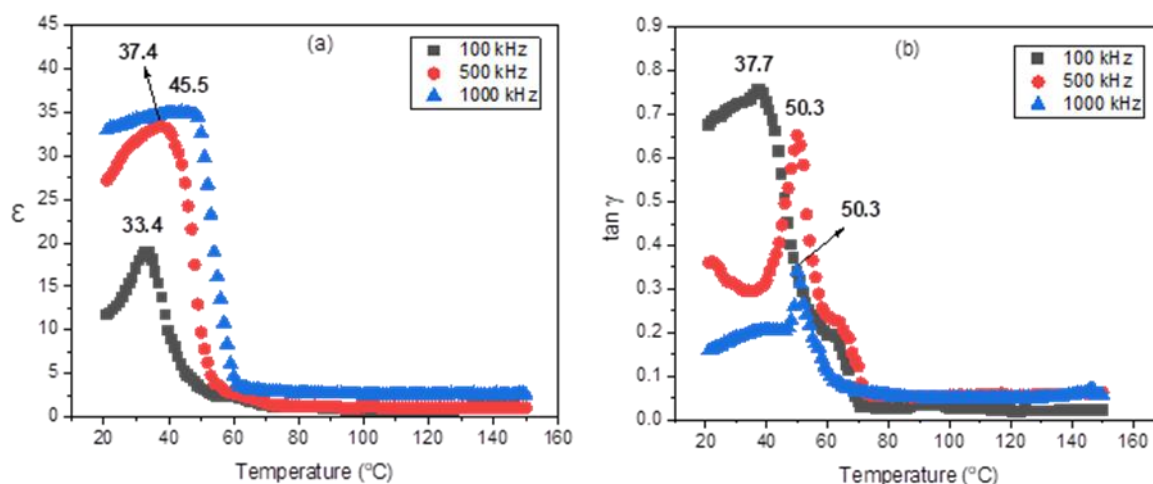


Рисунок 1. Диэлектрическая проницаемость (а) и тангенс угла диэлектрических потерь (б) оксида графена в зависимости от температуры при частотах 100, 500 и 1000 кГц.

Figure 1. (a) Dielectric permittivity and (b) loss tangent of the synthesized GO as a function of temperature at frequencies of 100, 500, and 1000 kHz.

Повышение температуры приводит к снижению диэлектрической проницаемости. С ростом частоты положение максимумов диэлектрической проницаемости и тангенса угла потерь смещаются по шкале температуры. После 70 °C величины ϵ и $\tan\delta$ близки друг другу, независимо от частоты измерения.

Литература

References

- [1] F. M. DashoorAl-jaafari, M. A. Mohammed, S. H. Shahad, L. N. Korotkov, N. A. Tolstykh, and M. A. Kashirin, "Study of dielectric properties of nanocrystalline material BaTiO₃-SiO₂," *Ferroelectrics*, vol. 612, no. 1, pp. 144–151, Aug. 2023, doi: 10.1080/00150193.2023.2211300.
- [2] L. N. Korotkov et al., "Influence of thermal treatment on dielectric and magnetic properties of nanocrystalline BaTiO₃," *Ferroelectrics*, vol. 543, no. 1, pp. 148–154, Apr. 2019, doi: 10.1080/00150193.2019.1592427.
- [3] G. Gallone, F. Carpi, D. De Rossi, G. Levita, and A. Marchetti, "Dielectric constant enhancement in a silicone elastomer filled with lead magnesium niobate–lead titanate," *Mater. Sci. Eng. C*, vol. 27, no. 1, pp. 110–116, Jan. 2007, doi: 10.1016/j.msec.2006.03.003.
- [4] C. Huang, Q. M. Zhang, G. DeBotton, and K. Bhattacharya, "All-organic dielectric-percolative three-component composite materials with high electromechanical response," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 84, no. 22, pp. 4391–4393, May 2004, doi: 10.1063/1.1757632.
- [5] L. J. Romasanta, M. Hernández, M. A. López-Manchado, and R. Verdejo, "Functionalised graphene sheets as effective high dielectric constant fillers," *Nanoscale Res. Lett.*, vol. 6, no. 1, p. 508, Dec. 2011, doi: 10.1186/1556-276X-6-508.

Зависимость проводимости от магнитного поля в условиях спин-зависимого рассеяния с учетом влияния силы Лоренца

А. А. Харченко^{а,*}, А. К. Федотов^а, Ю. А. Федотова^а, М. В. Чичков^б, М. Д. Малинкович^б

^а Научно-исследовательское учреждение "Институт ядерных проблем" Белорусского государственного университета, Минск, 220006, Беларусь

^б Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС», Москва, 119049, Россия

*e-mail: XaaTM@mail.ru, +375295995947

В работе рассматриваются три модели и методология их применения для описания поведения проводимости (σ) от магнитного поля (B) учитывающее одновременно спин-зависимое рассеяние носителей заряда (SDS) на (супер)парамагнитных центрах (с магнитным моментом m) и влияние силы Лоренца (СЛ).

Независимое использования уравнений:

$$\sigma(B) = \sigma_s(B) + \sigma_L(B) = \frac{\sigma_{L0}}{1+\mu^2 B^2} + \frac{\sigma_{s0}}{1-(C \cdot L(B))^2} \quad (1)$$

$$L(B) = \coth\left(\frac{mB}{k_B T}\right) - \frac{k_B T}{mB} = \coth(B_{ef}) - \frac{1}{B_{ef}} \quad (1.1)$$

где первое слагаемое отвечает за SDS, второе за СЛ, а C – постоянная задающая связь σ с намагниченностью, μ – подвижность носителей заряда. Модель 1 применима для неоднородных систем, где влияние СЛ и SDS происходит в разных пространственных областях. При этом 1 является относительно малочувствительными к таким параметрам m и μ , что в совокупности с относительно большим количеством варьируемых параметров может приводить к значительной ошибке определения при анализе экспериментальных данных.

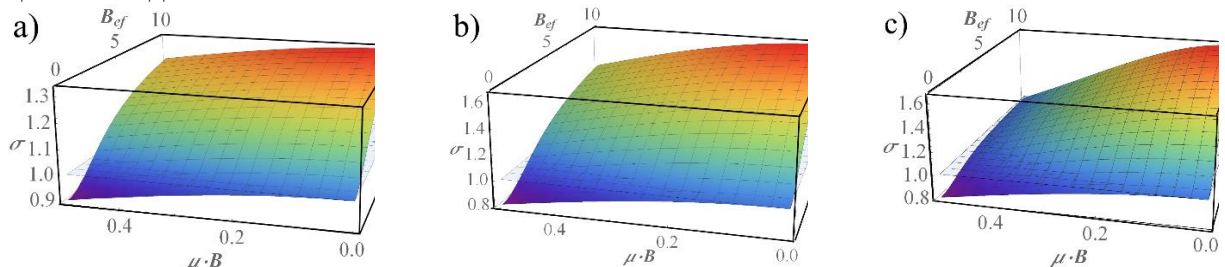
Одновременное не разнесённое в пространстве влияние СЛ и SDS на σ :

$$\sigma(B) = \frac{\sigma_0}{(1-(C \cdot L(B))^2)(1+\mu^2 B^2)} = \frac{\sigma_0}{1+\mu^2 B^2 - (C \cdot L(B))^2 - \mu^2 B^2 (C \cdot L(B))^2} \quad (2)$$

В однородных системах уменьшение рассеяния носителей заряда на магнитных включениях приводит к увеличению подвижности, то есть, возникает зависимость подвижности от магнитного поля. В тоже время это приводит к более сильному влиянию силы Лоренца. Модель, учитывающая влияния СЛ и SDS на $\mu(B)$:

$$\sigma(B) = \sigma_s(B) + \sigma_L(B) = \frac{\sigma_{L0}}{1+\mu^2 B^2} + \frac{\sigma_{s0}}{1-(C \cdot L(B))^2} \quad (3)$$

Наиболее корректно использовать в однородных системах модель 3, при этом для малых значениях предфактора перед функцией Ланжевена ($C \lesssim 0,1$) допускается использование упрощенной модели 1.



зависимость σ от B_{ef} и μB для моделей 1 (а), 2 (б) и 3 (в) при $C = 0,7$.

С. А. Серяков, М. Г. Черкасова, Н. Б. Морозова*

ФГБОУ ВО Воронежский государственный университет, Воронеж, 394018 Россия

*e-mail: mnb@chem.vsu.ru, +79803405880

Биметаллические системы на основе палладия и меди в последние десятилетия привлекают внимание исследователей и разработчиков функциональных материалов. Сплавы Pd–Cu находят широкое применение в качестве селективных мембран для очистки и получения водорода, каталитических покрытий для реакций окисления органических молекул, а также чувствительных элементов газовых сенсоров. Такие сплавы обладают уникальными свойствами, однако их электрохимическое поведение в кислых средах, особенно в анодной области, остается недостаточно изученным. Цель данной работы состояла в исследовании процессов, протекающих в анодной области потенциалов, для выявления механизма выделения водорода и определения области растворения меди из фольги сплава Pd–43Cu (масс. %) в сернокислом водном растворе.

Исследования проводили на медно-палладиевой фольге, состава 57 масс. % Pd–43 масс. % Cu, полученной методом холодной прокатки с последующим отжигом при 950 °С. Толщина исследуемого образца составляла 105 мкм. Подготовка поверхности фольги к эксперименту состояла в зачистке на наждачной бумаге P5000, затем на водной суспензии MgO и полировке на замше с последующим обезжириванием этанолом (х.ч.); после образец промывали в дистиллированной воде.

Электрохимические измерения проводились с использованием потенциостата Р-20Х методом циклической вольтамперометрии в широкой области потенциалов в растворе 0,1М H₂SO₄. Потенциодинамические $i, E(t)$ -кривые вели при разных скоростях сканирования потенциала $dE/dt = 0.5-100$ мВ/с и применением гидродинамического режима.

Установлено, что инжекция (при катодной поляризации) и экстракция водорода (при анодной) лимитируются одновременно скоростью переноса заряда и скоростью диффузии, причем в начальный момент времени перенос заряда происходит квазиобратимо, а скорость реакции контролируется диффузией. С увеличением доли массопереноса в общий процесс, квазиобратимый перенос заряда переходит в полностью необратимый. При этом стадия разряда/ионизации $H^+ + e^- \rightarrow H$ не является равновесной, а протекает с конечной скоростью.

Перемешивание электролита оказывает значительное влияние на величину токов пиков, не изменяя при этом характерных потенциалов электрохимических превращений. Пик ионизации водорода исчезает в результате подавления катодным процессом. Полученные результаты подтверждают диффузионную природу ограничений в статическом режиме.

Применение гидродинамического режима приводит к переходу диффузионного контроля к конвективно-диффузионному. И стадия переноса заряда реакции выделения водорода становится необратимой во всем диапазоне скоростей сканирования потенциала.

Выявлено, что область растворения меди в анодном процессе происходит при потенциале около 0.3 В, а восстановление в интервале потенциалов от 0.1 до 0.3 В в катодном цикле вольтамперограммы. Это подтверждается при проведении эксперимента в медьсодержащем растворе на фольге того же состава. Растворение меди из сплава Pd-43Cu происходит в диффузионном режиме со стороны жидкой фазы.

Анализ морфологии и свойств мезопористого кремния с наночастицами серебра

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

¹Воронежский государственный университет

²Воронежский государственный университет инженерных технологий;

E-mail: kmkseniya@yandex.ru

Мезопористый кремний является перспективной основой для сенсорных, оптоэлектронных и биомедицинских материалов благодаря развитой поверхности, регулируемой пористости и возможности направленной модификации [1]. Введение металлических наночастиц, в том числе серебра, позволяет изменять морфологию, химическое состояние и функциональные свойства пористого слоя [2–4].

Цель работы — анализ структурных изменений мезопористого кремния после нанесения серебра и оценка влияния металлизации на свойства поверхности. Мезопористые слои получали электрохимическим травлением монокристаллического кремния; серебро наносили термическим испарением. Топографию и распределение частиц исследовали методом атомно-силовой микроскопии, химическое состояние поверхности — методом инфракрасной спектроскопии.

Установлено, что наночастицы серебра располагаются на поверхности и в поровом пространстве, формируя преимущественно сферические агломераты. После металлизации наблюдаются частичное заполнение пор, сглаживание рельефа и повышение однородности поверхности по сравнению с исходным пористым кремнием. Изменение интенсивности ИК-полос, связанных с кремний-кислородными группами, указывает на модификацию поверхности и взаимодействие серебра с подложкой пористого кремния.

Таким образом, осаждение серебра приводит к формированию композитной системы с изменёнными морфологическими и поверхностными характеристиками. Полученные результаты согласуются с ранее опубликованными работами по металлизации пористого кремния [1, 2, 4] и подтверждают перспективность таких материалов для сенсоров, элементов оптоэлектроники, фотоэлектрических преобразователей и биомедицинских устройств.

Работа выполнена при поддержке РНФ № 25-73-00149.

1. Леньшин А.С., Ким К.Б., Агапов Б.Л., Кашкаров В.М., Лукин А.Н., Нифталиев С.И. Строение и состав композита пористого кремния с осажденной медью // Конденсированные среды и межфазные границы. 2023. Т. 25, № 3. С. 359–366. DOI: 10.17308/kcmf.2023.25/11259.

2. Ким К.Б., Леньшин А.С., Черненко С.С., Нифталиев С.И., Чукавин А.И. Исследование морфологии и состава поверхности наноструктурированной плёнки олова на пористом кремнии // Оптический журнал. 2024. Т. 91, № 10. С. 60–67. DOI: 10.17586/1023-5086-2024-91-10-60-67.

3. Canham L.T. Silicon quantum wire array fabrication by electrochemical and chemical dissolution of wafers // Applied Physics Letters. 1990. Vol. 57, No. 10. P. 1046–1048. DOI: 10.1063/1.103561.

4. Novara C., Petracca F., Virga A., Rivolo P., Ferrero S., Chiolerio A., Geobaldo F., Porro S., Giorgis F. SERS active silver nanoparticles synthesized by inkjet printing on mesoporous silicon // Nanoscale Research Letters. 2014. Vol. 9. Article 527. DOI: 10.1186/1556-276X-9-527.

К.С. Чирков*, О.В. Овчинников, М.С. Смирнов^a ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», Воронеж, 394018 Россия*e-mail: kirill200598@mail.ru, +74732208780

Большой боровский радиус (20 нм), а также малая ширина запрещённой зоны массивного кристалла (0.41 эВ) [1], позволяют настраивать область спектральной чувствительности квантовых точек (КТ) PbS от видимого до ближнего ИК диапазона [2], что позволяет использовать их при разработке фотодиодов.

Тем не менее, используемые при синтезе КТ PbS длинноцепочечные лиганды не позволяют применять данные КТ для создания фотодетекторов из-за ограничения подвижности носителей заряда. Стандартным методом улучшения подвижности носителей заряда в плёнках КТ является замена пассивирующего лиганда на короткоцепочечный. Однако процесс замены лиганда может приводить к формированию поверхностных дефектов, выступающих в роли центров локализации носителей заряда.

В работе представлены результаты исследования фоточувствительных сэндвич-структур оксид индия-олова (ITO)-КТ PbS-Al электрод, полученных на основе конденсатов КТ PbS, синтезированных с применением короткоцепочечного лиганда тиогликолевой кислоты (TGA) в качестве пассиватора [3]. Конденсаты были получены методом полива растворов КТ PbS, очищенных от продуктов реакции центрифугированием с ацетоном, на проводящие стёкла ITO без процедуры замены лиганда.

Фотоэлектрические свойства сэндвич-структур в работе исследовали в диапазоне длин волн от 700 до 1250 нм. Вольт-амперные характеристики аппроксимировали формулой Шокли для полупроводникового диода.

Управления фотоэлектрическими свойствами сэндвич-структур осуществляли с помощью галогенирования КТ PbS галогенидами калия: йодид калия (KI), бромид калия (KBr), хлорид калия (KCl). Водные растворы галогенидов калия вносили в раствор КТ PbS, после чего очищали раствор от продуктов реакции центрифугированием растворов КТ с ацетоном и поливали готовые растворы на подложку ITO.

В работе показано, что галогенирование КТ PbS сопровождается уменьшением тока смещения, а также параметра идеальности сэндвич-структур. Установлено, что галогенирование КТ PbS также приводит к росту квантовой эффективности сэндвич-структур на всём исследуемом диапазоне длин волн (700-1250 нм).

1. Scanlon W. W. Recent advances in the optical and electronic properties of PbS, PbSe, PbTe and their alloys // J. Phys. Chem. Solids. 1959. V. 8. P. 423-428. DOI: 10.1016/0022-3697(59)90379-8.

2. Nakashima S., Hoshino A., Cai J., Mukai K. Thiol-stabilized PbS quantum dots with stable luminescence in the infrared spectral range // J. Cryst. Growth. 2013. V. 378 P. 542–545. DOI: 10.1016/j.jcrysgro.2012.11.024.

3. Гревцева И.Г., Чирков К.С., Овчинников О.В., Смирнов М.С. Люминесценция квантовых точек PbS, пассивированных тиогликолевой кислотой, в присутствии йодида калия // Неорг. Мат. 2023. Т. 59, №10. С. 1079-1088. DOI: 10.31857/S0002337X23100044

Электрические свойства нанокомпозитов $(\text{CoFeB})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}$ и $(\text{CoFe})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}$ в сильных электрических полях

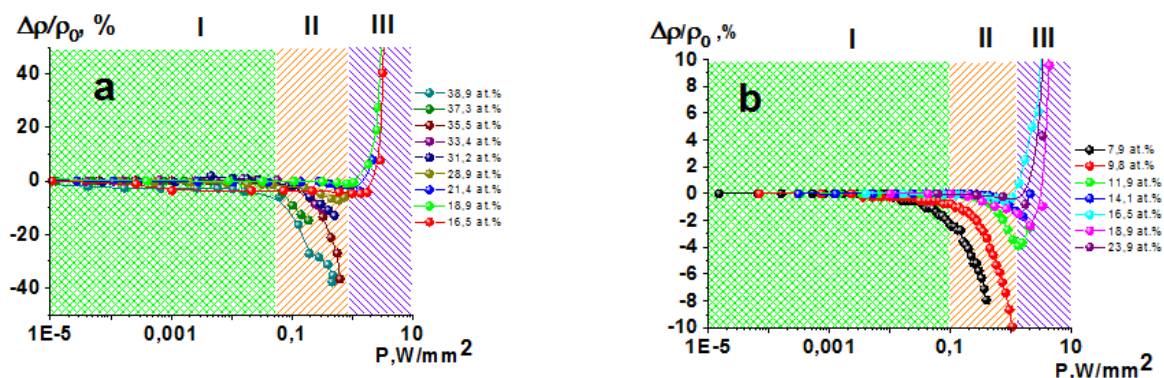
А.Р. Шакуров*, А.В. Ситников, Ю.Е. Калинин, И.В. Бабкина, А.Е. Никонов, Е.А. Осипов

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный технический университет», Воронеж,
394006 Россия

*e-mail: aleks.shakurov@mail.ru, +79155885225

В диапазоне рабочих значений токов и напряжений, которые используются для резистивного переключения в мемристивных структурах металл-НК-диэлектрик-металл возможны изменения электрических свойств НК в результате резистивного нагрева пленки и (или) за счет электростимулированной миграции атомов. Исследование посвящено выявлению данных процессов в пленках нанокомпозитов $(\text{CoFeB})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}$ и $(\text{CoFe})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}$.

Результаты исследования показали, что при удельной рассеиваемой мощности до 0.05 Вт/мм^2 изменения сопротивления НК не фиксируются. В диапазоне от 0.05 Вт/мм^2 до 1 Вт/мм^2 наблюдается снижение сопротивления, а когда P больше 1 Вт/мм^2 , сопротивление НК возрастает. Однако имеется одно существенное различие - если у НК $(\text{CoFeB})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}$ более интенсивное понижение сопротивления в области II наблюдается у составов с увеличением содержания металлической фазы, то в НК $(\text{CoFe})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}$ - с уменьшением x .



Зависимости относительного изменения удельного электрического сопротивления пленок НК $(\text{CoFeB})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}$ (a) и $(\text{CoFe})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}$ (b), измеренные при напряжении 0,1 В от удельной мощности, рассеянной на исследуемой структуре

Для объяснения данных зависимостей была предложена модель, согласно которой при большом токе измерений, когда приведенная мощность превышает 0.1 Вт/мм^2 , пленки подвергается нагреву, приводящему к необратимым резистивным изменениям гетерогенной структуры образцов, связанным в зависимости от приложенной мощности и концентрации металлической фазы с тремя различными процессами: увеличением размера гранул за счет денуклиации атомов металла, внедренных в диэлектрическую фазу на поверхности частиц, уменьшением концентрации дефектных состояний в диэлектрической прослойке между металлическими частицами, которые выступают в качестве локализованных состояний, участвующих в процессе электропереноса и изменением формы гранул от вытянутых в направлении роста пленки к более сферическим.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда в рамках проекта №25-29-00215

Каркас фуллеренов образует полость, размеры которой варьируются от 0,4 до 1 нм при переходе от C₆₀ к C₂₄₀ [1]. Фуллерены могут содержать атомы или более сложные частицы внутри этой полости. Особый интерес представляют эндоэдральные металлофуллерены (ЭМФ), поскольку электронный перенос между атомом металла и углеродным каркасом приводит к существенному изменению электронных и магнитных свойств исходного фуллерена [1]. Уникальные свойства ЭМФ дают возможность использовать данные структуры в таких областях как ЯМР-томография и спинтроника [2]. Диметаллофуллерены образуются в результате синтеза электродуговым методом вместе с монометаллофуллеренами, однако их выход существенно ниже [1] и они гораздо менее изучены.

В данной работе представлены результаты DFT-моделирования эндофуллерена Sc₂@C₈₂. Расчёты выполнены с использованием пакета Orca 6.1.0 [3]. Установлено, что наиболее стабильную форму образует 8-й изомер C₈₂ (рис. 1). Мультиплетность основного состояния равна 1. В рамках NBO-анализа [4] установлено наличие ковалентной связи Sc-Sc, образованной за счёт перекрывания гибридных орбиталей $sp^{0.68}d^{1.02}f^{0.01}$.

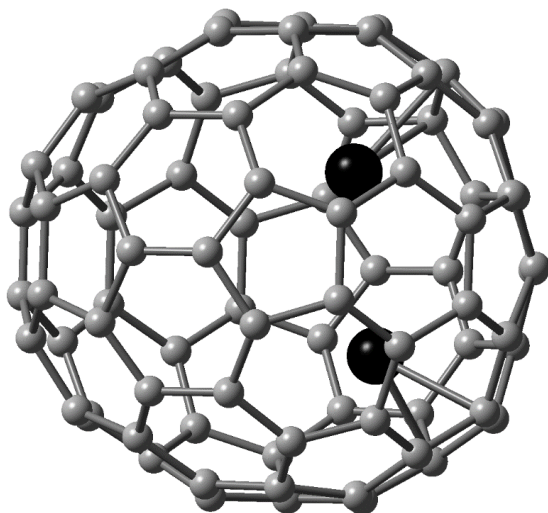


Рисунок 1. Структура наиболее устойчивого изомера Sc₂@C₈₂

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shinohara H. Endohedral metallofullerenes / Rep. Prog. Phys. 2000. V. 63. P. 843-892.
2. W. Harneit [et al.] Architectures for a spin quantum computer based on endohedral fullerenes / Physica status solidi (b). 2002. V. 233. P. 453-461.
3. Neese F. The ORCA Program System. Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci. 2012. V. 2. P. 73-78.
4. Reed A.E., Curtiss L.A., Weinhold F. Intermolecular Interactions from a Natural Bond Orbital, Donor-Acceptor Viewpoint / Chem. Rev. 1988. V. 88. P. 899-926.

Газочувствительные свойства хромитов иттрия, допированных ионами марганца и никеля

Якимчук М. А., Кострюков В. Ф.

Воронежский государственный университет
yakimchuk.720.46@gmail.com, 89042914110

Целью данной работы являлся синтез хромита иттрия цитратным методом и допирование образцов ионами никеля и марганца в количестве 5 и 10 ат.%, установление их фазового состава и исследование газочувствительных свойств.

Рассчитанное количество солей нитрата хрома и иттрия для получения хромита иттрия растворили в воде, нагрели, добавили раствор аммиака, а затем лимонную кислоту. Далее кипятили и выпаривали до образования пепла. Полученный порошок отжигали в муфельной печи. Допирование ионами марганца и никеля проводилось путем замены солей нитрата хрома на соли нитратов марганца и никеля в стехиометрическом соотношении [1].

Полученные порошки были исследованы методом рентгенофазового анализа (РФА). Было установлено, что все порошки являются однофазными и содержат только хромит иттрия. Для исследования газочувствительных свойств нанопорошки хромитов иттрия были диспергированы и нанесены на токопроводящий элемент [2]. У полученных пленок измерили удельное поверхностное сопротивление на воздухе, а затем в присутствии газа NH_3 , концентрация которого составляла 50 ppm. Таким образом, в исследованном температурном интервале газочувствительный отклик полученных образцов достигает максимума – 57% для образца $\text{YCr}_{0,9}\text{Mn}_{0,1}\text{O}_3$, 55% для порошка $\text{YCr}_{0,9}\text{Ni}_{0,1}\text{O}_3$, 53% для образцов YCrO_3 и $\text{YCr}_{0,95}\text{Mn}_{0,05}\text{O}_3$, а также 49% для $\text{YCr}_{0,95}\text{Ni}_{0,05}\text{O}_3$.

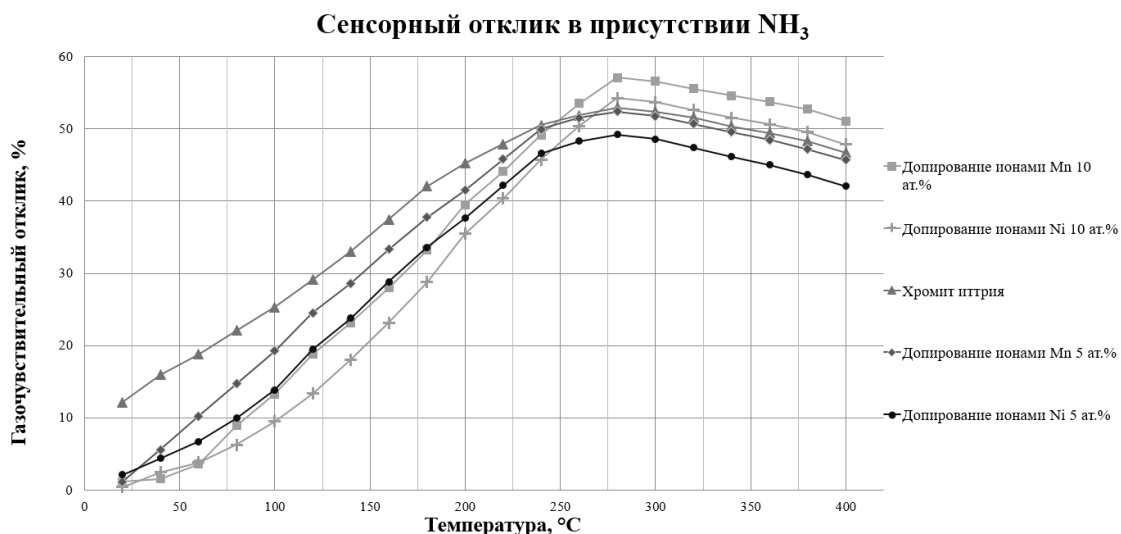


Рис. 1. Зависимость газочувствительного отклика от температуры для всех исследуемых образцов на воздухе и в атмосфере NH_3

1. Гусева А. Ф. Методы получения наноразмерных материалов. Курс лекций / А. Ф. Гусева, А. Я. Нейман, С. С. Нохрин. – Екатеринбург, 2007. – 79 с.
2. Шалимова К. В. Физика полупроводников / К. В. Шалимова. – Москва: Энергоатомиздат, 1985. – 392 с.

Применение полуволоконных мембран в задачах улавливания азота из азотно-кислородной газовой смеси транспортабельными газодобывающими станциями

Янкина Кристина Юрьевна

ВУНЦ ВВС «ВВА имени профессора Н.Е. Жуковского и Ю.А. Гагарина», г. Воронеж, РФ

YankinaKU@mail.ru, 8-(920)-444-55-27

Процессы разделения и очистки газов играют важную роль в современной науке и технике. Существуют различные методы газоразделения – криогенная дистилляция, короткоцикловая адсорбция, абсорбционный метод и мембранное разделение. Основным способом получения чистых газов, таких как кислород и азот, является энергоёмкий криогенный метод. Известной альтернативой традиционным технологиям получения этих газов является мембранное газоразделение. Его преимуществами являются высокая производительность, низкая энергоёмкость, экологическая безопасность, сравнительно низкая стоимость эксплуатации и простота интеграции в существующий промышленный процесс, что особенно важно для стоящих на вооружении крупногабаритных транспортабельных газодобывающих станций.

Движущей силой процесса в мембранных материалах является градиент химического потенциала по разные стороны мембраны. Этот процесс позволяет совместить в одном устройстве (мембранном модуле), компактность и гибкость мембранной технологии с высокой селективностью абсорбционных процессов. Эффективность мембранной технологии, степень и чистота извлекаемых компонентов определяются свойствами материала мембраны и полнотой их реализации в разделительном процессе.

В работе проведены расчеты производительности мембранных модулей в зависимости от общей площади мембраны в таких модулях. Рассматривали коммерчески доступные полуволоконные мембраны на основе полифениленоксида и полисульфона с коэффициентом селективности 5 и 3,9, соответственно. Все расчеты выполнялись при давлении в напорном канале модуля, которое варьировалось от 1,0 МПа до 1,3 МПа. Расход газовой смеси через мембрану оценивали согласно [1, 2], рассматривая воздушную газовую среду, как бинарную смесь с массовым содержанием кислорода и азота 21,0 % и 79,0 %, соответственно.

Анализ полученных результатов показывает, что максимальное извлечение азота из азотно-кислородной газовой смеси до технической чистоты достигается после 6 модуля при поддержании на входе в блок температуры 55 °С и давлении 1,3 МПа. Производительность такой установки равна 0,25 нм³/мин (18,6 кг/ч). Следует отметить, что на процесс разделения газов в полуволоконной мембране наибольшее влияние оказывают безразмерные величины, связанные с: отношением давлений на входе и выходе из мембранной установки; отношением скоростей фильтрации внутри и вне трубок мембраны; отношением расхода газа внутри мембраны к расходу газа снаружи мембраны.

1. Дытнерский Ю.И., Брыков В.П., Каграманов Г.Г. Мембранное разделение газов // – М.: Химия, 1991. – 344 с.

2. Бондаренко В.Л. Применение мембранных процессов в технологиях разделения газовых смесей на основе компонентов воздуха // Технические газы. – 2012 – № 2. – С.19–30.

СОДЕРЖАНИЕ

I Всероссийская с международным участием научная конференция «Развитие методов моделирования, синтеза, исследования структуры и свойств материалов», посвящённая памяти академика В.М. Иевлева. Воронеж, 05–08 октября 2026 г.

ПЛЕНАРНЫЕ И УСТНЫЕ ДОКЛАДЫ

<i>А.Б. Ярославцев</i> Палладиевые мембраны: дизайн и приложения	6
<i>А.А. Ремпель</i> Фундаментальные направления развития современной металлургии	8
<i>Е.А. Гудилин</i> Дефектная структура перспективных перовскитных материалов	9
<i>А.Г. Колмаков, М.А. Севостьянов, С.А. Конушкин, М.А. Каплан</i> Новые экологически безопасные титановые сплавы	10
<i>Б.М. Даринский, А.С. Прижимов</i> Элементный состав специальных межкристаллитных границ в поликомпонентных кристаллах	13
<i>Э.П. Домашевская, А.С. Леньшин, Ю.А. Полковникова, О.В. Черноусова, В.Е. Фролова, И.Е. Занин</i> Фазовый состав и молекулярные связи гибридных наноструктур пористого кремния с осажденным циннаризином	14
<i>Т.П. Дьячкова, А.Е. Меметова, А.Д. Зеленин, В.С. Ягубов, И.В. Гутник, А.А. Дмитриевский, Н.Р. Меметов</i> Высокопористый углеродный адсорбент из панцирей креветок для регулирования состава питательной среды при микроклональном размножении растений	16
<i>А.Р. Кауль, М.Н. Маркелова, А.А. Хафизов, И.Э. Грабой</i> МОСVD тонких пленок спинтронного назначения	17
<i>Ю.Е. Калинин, А.В. Ситников, И.И. Попов, В.Б. Багатнов</i> Влияние дефектов структуры на неупругие и электрические свойства аморфного оксида олова	18
<i>А.В. Кнотько, В.И. Путьяев</i> Особенности фундаментального материаловедческого образования в филиале МГУ в городе Душанбе	19
<i>С.А. Кукушкин, А.В. Осипов</i> Термодинамика, кинетика и технология синтеза эпитаксиальных слоев нанокарбида кремния на кремнии методом согласованного замещения атомов и его уникальные свойства	20
<i>С.В. Рогожкин, А.А. Лукьянчук, О.А. Разницын, А.С. Шутов, А.А. Никитин, А.А. Хомич, Н.А. Искандаров, А.В. Клауз</i> Атомное картирование распределений химических элементов в наноструктурах материалов методом атомно-зондовой томографии	22
<i>А.В. Ситников, А.Р. Шакуров, Ю.Е. Калинин, И.В. Бабкина, А.Е. Никонов, Е.А. Осипов</i> Мемристивные структуры М/НК/Д1/Д2/М на их основе нанокompозитов CoFeB-SiO ₂ , CoFe-SiO ₂ , Co-SiO ₂	23
<i>Е.О. Филатова</i> Физика и химия формирования межслоевых областей в нейтронных и рентгеновских зеркалах	24
<i>Г.В. Афонин, В.А. Хоник</i> Ультразвуковая резонансная спектроскопия и ее применение для исследования материалов	25
<i>Ю.Р. Колобов</i> Закономерности и механизмы инициируемых воздействием лазерных импульсов структурных и фазовых превращений в приповерхностных слоях и их влияние на свойства металлических материалов	26
<i>В.К. Жидков, М.А. Каплан, Я.А. Морозова, А.Г. Колмаков, М.А. Севостьянов</i> Новые высокоэнтропийные сплавы медицинского назначения на основе Ti	27
<i>Е.Б. Модин</i> Трехмерная характеристика поверхностей в РЭМ: микрофотограмметрия и стереореконструкция	28
<i>И.С. Павлов</i> Стандартизация данных для обучения ИИ при разделении перекрывающихся данных 3D электронной дифракционной томографии	29
<i>В.И. Путьяев, П.В. Евдокимов, А.В. Гаршев, Е.С. Климашина, Я.Ю. Филиппов, Н.В. Леонтьев, Д.О. Голубчиков, А.М. Мурашко</i> Биокерамика сложного химического состава: высокоэнтропийные материалы для регенерации костной ткани	30
<i>А.М. Абакумов</i> Спектроскопия характеристических потерь энергии электронов как метод исследования локальной структуры и состава материалов	31
<i>А.В. Бугаев, С.С. Сахоненков, Е.О. Филатова</i> Стабилизация межфазовых границ в многослойных зеркалах Ru/B4C с помощью углеродных барьерных слоёв	32
<i>А.Л. Васильев, Э.М. Пашаев, И.А. Субботин, И.Н. Трунькин</i> Электронная микроскопия пленок NiO, легированных Fe	33
<i>Ф.А. Вдовенков, О.А. Козадеров, П.П. Тараканов</i> Учёт шероховатости поверхности электроосажденных медных покрытий в кинетике катодного восстановления нитрат-иона	34

<i>М.А. Гадебская, М.А. Васильев, В.А. Крысанов</i> Комплексное исследование структуры серебросодержащих нанокмполитов методами РСА и РСМА	35
<i>И.Э. Грабой, М.Н. Маркелова, В.Д. Мищенко, Чжао Чжюань, А.В. Королева, Н.Н. Перов, А.В. Назаров, А.Л. Васильев, А.Р. Кауль</i>	
Синтез, структура и свойства тонких пленок диоксида хрома	36
<i>С.Н. Грушевская, М.Ю. Бочарникова, А.В. Введенский</i> Анодная модификация сплавов для создания пористых структур	37
<i>П.Д. Дрожилкин, Н.В. Сомов</i> Алгоритм поиска моноклинных кристаллов, способных претерпевать структурные фазовые переходы второго рода с перестройкой в ромбическую фазу.....	38
<i>В.А. Дыбов, В.А. Еремин, А.Р. Ахмадеев, Ф.Ю. Бочканов, Е.А. Богданова, А.А. Маркин, С.А. Стрелков, Г.С. Сафронов, Д.С. Боровитин, А.А. Михайлова, К.А. Щербакова, А.Б. Стариков, А.Я. Акыева, И.Д. Пономарев</i> Тонкие пленки сложных оксидов, как функциональные слои в твердооксидных топливных элементах	39
<i>О.М. Жигалина, Д.Н. Хмеленин, В.Г. Басу, В.А. Якушев, А.С. Вишневский, К.А. Воротилов</i>	
Электронная микроскопия пленок, полученных методом атомно-слоевого осаждения.....	40
<i>Д.О. Зайцев, Н.А. Борц</i> Компьютерное моделирование стабилизации фуллерена C ₂₆ инкапсулированием атомов 3d-переходных металлов.....	41
<i>Е.А. Ильина, О.А. Козадеров, Н.В. Соцкая</i> Влияние органических добавок разного типа на кинетику электрокристаллизации меди и морфологию электроосажденных медных покрытий.....	42
<i>Д.А. Калганов, Д.Ю. Панов, В.А. Спиридонов, Д.А. Бауман, А.Е. Романов</i> Исследование объёмных кристаллов оксида галлия методами резонансной акустической спектроскопии	43
<i>И.А. Каратеев</i> DiffSolver – программа для автоматизированной расшифровки дифракционных картин.....	44
<i>А.В. Кнотько, В.И. Путляев, Е.А. Гудилин, А.В. Лукашин</i>	
«Химия, физика и механика материалов» как междисциплинарное направление подготовки студентов – опыт факультета наук о материалах МГУ	45
<i>О.А. Козадеров, Ф.А. Вдовенков, Е.В. Бедова</i> Селективное растворение сплавов как метод управления рельефом поверхности и электрокаталитической активностью электродного материала.....	46
<i>А.С. Леньшин, В.Е. Фролова, Э.П. Домашевская</i> Влияние геометрии модельных рисунков 3d-печати на микроструктуру и гидрофильные свойства образцов из полимеров PLA, PETG и ABS.....	47
<i>М.Н. Маркелова, И.Э. Грабой, А.А. Хафизов, А.О. Озеренская, В.Д. Мищенко, А.К. Кадикова, Р.В. Юсупов, А.Р. Сафин, А.Р. Кауль</i>	
МОСVD эпитаксиальных пленок и гетероструктур на основе гематита.....	48
<i>И.В. Нечаев</i> Квантово-химическое моделирование газофазной адсорбции глицина на поверхности никеля.....	49
<i>О.В. Овчинников, М.С. Смирнов</i> Фотостимулированное управление люминесценцией коллоидных квантовых точек	50
<i>А.О. Петрова, А.У. Гайсин, А.В. Бугаев, В.А. Матвеев, С.С. Сахоненков, Е.О. Филатова</i>	
Структурные и магнитные свойства многослойных наноструктур Fe/Co.....	51
<i>С.Г. Пономарев, В.Е. Базарова, Е.Д. Верхова, Е.К. Серова, А.Н. Хрустале</i>	
Конденсаторные диэлектрики системы LaAlO ₃ -CaTiO ₃ -SrTiO ₃	52
<i>Ю.Р. Рассолова, А.М. Мурашко, Я.Ю. Филиппов, В.И. Путляев</i> Биорезорбируемая керамика на основе смешанных фосфатов кальция-натрия-магния для регенерации костной ткани	53
<i>А.Д. Горбенко, М.А. Каплан, М.А. Севостьянов</i> Коррозионная стойкость β-титанового сплава Ti-38Zr-11Nb с добавлением серебра.....	54
<i>М.Е. Пруцков, С.В. Конушкин, М.А. Севостьянов, А.Г. Колмаков</i> Влияние режимов термической обработки на структуру и механические свойства биомедицинских титановых сплавов Ti-Nb-Mo.....	55
<i>С.А. Солдатенко, С.Б. Куцев, В.О. Текутьева, Е.К. Белоногов</i> Фотонная карбидизация кремния и нанокристаллическая структура пленок β-SiC.....	56
<i>А.А. Суркова, В.Ф. Кострюков</i> Синтез и газочувствительные свойства нанопорошков кобальтита иттрия, легированных ионами никеля (2+)	57
<i>М.В. Ткаченко, Н.Б. Морозова, А.В. Введенский</i> Водородопроницаемость фольги Pd ₆ Ru в щелочной и кислых средах	58
<i>Д.О. Фролов, С.С. Манохин, Ю.Р. Колобов</i> Эффект Наими в титановом сплаве ВТ6	59
<i>А.К. Цветников</i> Термоградиентный синтез и физико-химические, прикладные свойства высокодисперсных фторуглеродных соединений.....	60

<i>А.А. Ширяев</i> Наноалмазы и наноразмерные дефекты в макрокристаллах алмаза	61
<i>И.В. Нечаев, Н.Д. Щедрин</i> Квантово-химическое моделирование эндофуллерепа $\text{Sc}_2@\text{C}_{82}$	62
<i>Н.М. Яковлева, К.С. Степанова, И.Н. Дмитриев, А.Н. Кокатев</i> Композитные покрытия с анодно-оксидной матрицей на пористых порошковых материалах из губчатого титана	63
СТЕНДОВЫЕ ДОКЛАДЫ	
<i>Э.М. Акберова, В.И. Васильева</i> Морфология поверхности протонообменной мембраны МФ-4СК	65
<i>Э.М. Акберова, В.И. Васильева, С.В. Добрыдень</i> Структурная неоднородность экспериментальных гетерогенных мембран RALEX AM PES И МА-41 с разным содержанием анионообменной смолы	66
<i>В.В. Артемов, В.И. Бондаренко, Д.Б. Трушина</i> Исследование микроструктуры микронных и субмикронных частиц ватерита методом 3D ФИП-томографии	67
<i>Е.Д. Астрединова, К.А. Барков, А.А. Скиданов, Е.А. Царёва, Е.С. Керсновский, И.В. Польшин, Я.А. Пешков</i> Структурно-фазовые превращения в монокристаллическом Si при термомиграции Al	68
<i>О.М. Жигалина, Д.Н. Хмеленин, В.Г. Басу, Д.С. Серегин, К.А. Воротилов</i> Электронная микроскопия пористых пленок TiO_2	69
<i>Д.Б. Агаджанян, Т.В. Бугакова, Н.Б. Морозова, А.И. Донцов</i> Влияние сульфидирования фольги Cu-Pd сплава в процессах инъекции и экстракции атомарного водорода	70
<i>В.В. Бабаков, К.А. Барков, С.А. Ивков, Д.Н. Нестеров, Г.П. Потуданский</i> Исследование фазового состава и структуры нанокompозитных пленок Ag-Si, полученных ионно-лучевым распылением	71
<i>К.А. Барков, С.А. Ивков, А.И. Чукавин, Е.С. Керсновский, И.В. Польшин, Е.И. Гайворонская, М.И. Гайворонская, Е.А. Царева, А.А. Скиданов</i> Анализ фазового состава пленок SIPOS, полученных пиролизическим осаждением моносилана и закиси азота, по данным УМРЭС и РФЭС	72
<i>И.Н. Вихарева, Г.И. Макаров</i> Молекулярно-динамическое исследование механизма пластификации поливинилхлорида эфирами дикарбоновых кислот	73
<i>Л.М. Волкова</i> Структурно-индуцированные магнитные переходы в слоистых дихалькогенидах MoQ_2 ($\text{Q} = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) и двойных гидроксидов $(\text{M}^{2+})_6\text{Al}_3(\text{OH})_{18}[\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_6](\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ($\text{M}^{2+} = \text{Mn}^{2+}, \text{Fe}^{2+}$) под действием механических деформаций	74
<i>Л.М. Волкова</i> Кристаллохимические исследования и прогноз новых материалов	74
<i>Ю.Н. Власов, А.В. Буданов, Н.И. Репников, Е.В. Руднев, В.Е. Фролова, А.М. Чертолясов, Э.П. Домашевская</i> Влияние вакуум-термических отжига на структурные, электрические и оптические характеристики коммерческих образцов прозрачных проводящих оксидов ИТО и ФТО	76
<i>Е.И. Гайворонская, М.И. Гайворонская, И.В. Польшин, Е.С. Керсновский, С.А. Ивков, Я.А. Пешков, А.И. Чукавин, Г.П. Потуданский, Н.В. Пермяков, Н.А. Бориц, А.Е. Никонов, А.В. Ситников, К.А. Барков</i> Исследования фазового состава ионно-лучевых пленок Ta-Si методом ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии и рентгеновской рефлектометрии	77
<i>М.И. Гайворонская, Е.И. Гайворонская, И.В. Польшин, Е.С. Керсновский, С.А. Ивков, Я.А. Пешков, А.И. Чукавин, Г.П. Потуданский, Н.В. Пермяков, Н.А. Бориц, А.Е. Никонов, А.В. Ситников, К.А. Барков</i> Анализ формирования фазы Mo_5Si_3 в пленке Mo-Si по данным ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии и рентгеновской рефлектометрии	78
<i>М.В. Попов, В.В. Артемов, А.Л. Головин, А.Л. Васильев</i> Исследование алмазоподобных пленок на кремнии	79
<i>Д.О. Голубчиков, П.В. Евдокимов, В.И. Путляев</i> Композитные биоматериалы на основе конденсированных фосфатов кальция для тканевой инженерии костной ткани	80
<i>С.В. Горбунов, В.С. Касьянов, В.А. Дементьев</i> Исследование стабильной работы мембранного элемента (МЭ) с мембраной из сплава (Pd-8,3ат.-%Sm) в продуктах плазмохимического пиролиза метана	81
<i>О.М. Губанов</i> Моделирование насыщения электротехнической стали кремнием	82
<i>А.А. Дегтярев, А.В. Тришина, Т.П. Дьячкова, И.В. Гутник, Н.А. Чапаксов</i> Моделирование адсорбции воды и спиртов на поверхности MePc ($\text{Me} = \text{Cu}, \text{Zn}, \text{Co}$)	83
<i>А.М. Дерябин, О.В. Стогней, А.В. Ситников, В.А. Макагонов</i> Туннельное магнитосопротивление в магнитоупорядоченных нанокompозитах $\text{Fex}(\text{ZrO}_2)_{100-x}$ с избыточным содержанием кислорода	84
<i>С.В. Добрыдень, Я.Р. Беспалова, В.И. Васильева, Э.М. Акберова</i> РЭМ в изучении морфологии поверхности гетерогенных мембран с разным содержанием анионообменной смолы	86
<i>А.И. Донцов</i> Механизм упорядочения твердого раствора Pd-Cu по типу B2: атомный аспект	87

<i>А.И. Бочаров, Н.А. Толстых, И.С. Ефимцев, Л.Н. Коротков</i> Диффузионное легирование титаната стронция барием	88
<i>Е.В. Иевлева, Н.А. Толстых, Л.Н. Коротков, Ш. Li, Б.К. Абдулвахидов, К.Г. Абдулвахидов</i> Влияние интенсивной механической обработки на кристаллическую структуру и магнитные свойства ультрадисперсного титаната стронция	89
<i>И.А. Зур, Ю.А. Федотова</i> Моделирование структуры и расчёт фононной теплопроводности алмазоподобного углерода (DLC) с примесными атомами кобальта методом молекулярной динамики	90
<i>А.В. Калгин, Б.М. Даринский</i> Прямой магнитоэлектрический эффект в кольцевом композите Fe-Ni / PZT.....	91
<i>Е.С. Климашина, П.Е. Середенко, А.К. Пупанова, Ю.Р. Рассолова, А.М. Мурашко, В.И. Путляев</i> Гидролитическая конверсия магний-натрий фосфатной керамики для биомедицинских применений	92
<i>А.В. Кнотько, А.Т. Одинаева, А.А. Попов, О.О. Сулайманова</i> Получение биосовместимых Са содержащих фосфатов конверсией в высокоосновных растворах	93
<i>С.С. Копытин, Е.К. Белоногов</i> Безинерционное фазовое превращение PdO→Pd в тонких пленках	94
<i>С.С. Копытин, Е.К. Белоногов</i> Топотаксия Pd/PdO в тонких плёнках при импульсном фотонном отжиге.....	95
<i>Л.Н. Коротков, М.А. Панкова</i> Низкочастотное внутреннее трение в сополимерах VDF ₈₈ /Tr ₁₂ в окрестностях температуры плавления	96
<i>А.В. Костюченко, Е.К. Белоногов</i> Исследование субструктуры пленок и керамики гидроксиапатита методом просвечивающей электронной микроскопии	97
<i>А.В. Костюченко, Д.А. Середин, А.Р. Шакуров, А.Е. Никонов, Е.Н. Федорова</i> Структурно-фазовые превращения на границах раздела в многослойных оксидных системах по данным рентгеновской дифрактометрии.....	98
<i>Т.А. Кравченко</i> Макрокинетика и динамика сорбции с движущимися границами химических реакций на металл-ионообменных композитах для интенсивной нанотехнологии	99
<i>Е.В. Кукуева</i> Микроструктура биокерамик на основе биорезорбируемых слоистых фосфатов кальция	100
<i>И.С. Павлов, Ю.Р. Колобов, И.А. Стучебрюхов, А.С. Кумсков, А.Л. Васильев</i> Электронно-микроскопическое исследование поверхности и структурно-фазового состояния приповерхностных слоев сплава ВТ1-0 после обработки лазерными импульсами пикосекундной длительности	101
<i>С.Б. Куцев, С.А. Солдатенко, Т.Л. Тураева, Б.М. Даринский, С.Н. Чернышов</i> Безызлучательные переходы и передача энергии атомным кластерам при импульсной фотонной обработке гетероструктуры Si/C...Si/C: синтез нанокристаллических плёнок SiC	102
<i>Н.В. Леонтьев, Д.Д. Погорельская, П.В. Евдокимов, В. И. Путляев</i> Высокоэнтропийная резорбируемая биокерамика на основе структур с тетраэдрическими анионами для регенерации костной ткани	103
<i>А.А. Камынин, Д.А. Лисицкий, Н.В. Коротунов, А.И. Бочаров, Н.А. Толстых, И.И. Попов, Л.Н. Коротков</i> Особенности низкочастотного внутреннего трения в твердом растворе 0.9Pb _{0.95} Sr _{0.05} (Zr _{0.52} Ti _{0.48})O _{3-0.05} Pb(Zn _{1/3} Nb _{2/3})O _{3-0.05} Pb(Mn _{1/3} Sb _{2/3})O ₃ + 0.001 CeO ₂	104
<i>А.А. Лутченко, К.А. Барков, С.А. Ивков, И.В. Польшин, Е.И. Гайворонская, Е.С. Керсновский, А.И. Чукавин, А.Н. Бельтюков, А.Е. Никонов, А.В. Ситников</i> Анализ фазового состава композитных пленок Al-Si, полученных методом ионно-лучевого распыления	105
<i>А.М. Мурашко, В.А. Битанова, П.В. Евдокимов, В.И. Путляев</i> Иерархические композиты на основе бифазной кальцийфосфатной керамики и гидрогелей ПЭГДА для регенеративной медицины	106
<i>Я.М. Немых, В.Ф. Кострюков</i> Влияние допирования ионами Mn ²⁺ на структуру и газочувствительные свойства LaFeO ₃	107
<i>А.В. Овчаров, А.Л. Васильев, П.Н. Дегтяренко, И.А. Каратеев, М.С. Новиков</i> Микроструктурные исследования ВТСП лент 2-го поколения с искусственными центрами пиннинга различного типа	109
<i>Т.Д. Пацаев</i> Установка для исследования in situ механических свойств полимерных материалов в камере растрового электронного микроскопа.....	110

<i>Н.В. Пермяков, Г.П. Потуданский, Е.С. Керсновский, Е.И. Гайворонская,</i> <i>К.А. Барков, Е.К. Белоногов</i> Ближний порядок и электронная структура в сплаве $\text{Fe}_{80}\text{P}_{14}\text{Si}_6$	111
<i>Н.В. Пермяков, Е.К. Белоногов</i> Кристаллизация и фазовый состав быстро закалённых лент Ti-Ni-Cu	112
<i>Я.А. Пешков, К.А. Барков, Е.И. Гайворонская, А.В. Ситников, С.А. Ивков</i> От CoFeV к $\text{Fe}_x\text{Si}_{1-x}$: ферромагнитный электрод для спинтроники будущего	113
<i>И.В. Польшин, Е.И. Гайворонская, М.И. Гайворонская, Е.С. Керсновский, А.В. Ситников,</i> <i>К.А. Барков</i> Исследование фазового состава тонких пленок Mo-Si методом УМРЭС.....	114
<i>И.В. Протасова, Н.В. Брысенкова, Е.В. Ворошилина</i> Особенности структуры и свойств мелкодисперсного никеля, сформированного из никель-цинкового сплава.....	115
<i>А.Н. Рогова, Т.Ю. Коломиец, К.А. Солнцев</i> Синтез нанопорошка алюмомагниевого шпинели методом совместного осаждения для получения прозрачной керамики.....	116
<i>А.В. Романов</i> Квантово-химическое моделирование адсорбции атомарного водорода на тонких пленках тяжелых металлов	117
<i>Е.В. Руднев, М.А. Никонов, Ю.Н. Власов</i> Метастабильная фаза Ag_2O_3 в тонкой плёнке Ag_2S	118
<i>Г.С. Савин, В.А. Бородин</i> Поверхностные и объёмные механизмы переноса кислорода в магнетите Fe_3O_4	119
<i>К.В. Сергиенко, Т.М. Севостьянова</i> Влияние покрытия на структуру и механические свойства низкомодульного биосовместимого сплава Ti-Zr-Nb	120
<i>П.С. Смерчанский, В.В. Коледов, А.П. Каманцев, Д.Д. Кузнецов, О.Е. Ковалев, Р.А. Сафонов,</i> <i>И.Ф. Грибанов, А.В. Головчан, Н.Ю. Нырков, С.С. Жданов, В.М. Поварницын</i> Фазовые переходы в сплаве Гейслера $\text{Ni}_{2,14}\text{Mn}_{0,81}\text{Fe}_{0,05}\text{Ga}$ при воздействии внешнего магнитного поля и гидростатического давления	121
<i>П.С. Соколов, А.В. Захарова, А.М. Сергеев, Л.В. Ермакова</i> Изготовление керамики на основе сульфатов стронция и бария со сложной геометрией методом стереолитографии.....	122
<i>С.А. Солдатенко, В.О. Текутьева</i> Фазовый состав нанопластин SiC , полученных стримерным разрядом в $\text{SiC}(4\text{H})$	123
<i>А.В. Станчик, В.Ф. Гременок, С.Г. Петросян, А.М. Хачатрян</i> Оптические свойства тонких полупроводниковых пленок MoS_2	124
<i>А.А. Суркова, В.А. Костина</i> Газочувствительные свойства нанопорошков LaCoO_3 легированных ионами Ni^{2+} полученных цитратным методом.....	125
<i>П.П. Тараканов, Ф.А. Вдовенков, О.А. Козадеров</i> Параметры шероховатости гальванических медных покрытий	126
<i>Набаа Хави Хасан, Махди А. Мохаммед, Фирас Мохаммед Дашур Аль-Джаафари</i> Диэлектрические свойства оксида графена синтезированного методом электрохимического окисления.....	127
<i>А.А. Харченко, А.К. Федотов, Ю.А. Федотова, М.В. Чичков, М.Д. Малинкович</i> Зависимость проводимости от магнитного поля в условиях спин-зависимого рассеяния с учетом влияния силы Лоренца	129
<i>С.А. Серяков, М.Г. Черкасова, Н.Б. Морозова</i> Анодное поведение фольги сплава Cu-Pd в кислой среде.....	130
<i>А.С. Леньшин, К.Б. Ким, С.С. Черненко, С.И. Нифталиев, М.В. Гречкина</i> Анализ морфологии и свойств мезопористого кремния с наночастицами серебра.....	131
<i>К.С. Чирков, О.В. Овчинников, М.С. Смирнов</i> Управление электрофизическими свойствами сэндвич-структур на основе конденсатов квантовых точек PbS	132
<i>А.Р. Шакуров, А.В. Ситников, Ю.Е. Калинин, И.В. Бабкина, А.Е. Никонов, Е.А. Осипов</i> Электрические свойства нанокompозитов $(\text{CoFeV})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}$ и $(\text{CoFe})_x(\text{SiO}_2)_{100-x}$ в сильных электрических полях.....	133
<i>И.В. Нечаев, Н.Д. Щедрин</i> Квантово-химическое моделирование эндофуллерена $\text{Sc}_2@\text{C}_{82}$	134
<i>М.А. Якимчук, В.Ф. Кострюков</i> Газочувствительные свойства хромитов иттрия, допированных ионами марганца и никеля.....	135
<i>К.Ю. Янкина</i> Применение полуволоконных мембран в задачах улавливания азота из азотно-кислородной газовой смеси транспортабельными газодобывающими станциями	136

Научное издание

РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ, СИНТЕЗА, ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ

Сборник научных трудов
1 Всероссийской конференции с международным участием,
посвященной памяти академика В. М. ИЕВЛЕВА

05–08 октября 2026 г.
Воронеж

Издание публикуется в авторской редакции
и авторском наборе

Подписано в печать 16.09.2026. Формат 60×84/16
Усл. печ. л. 16,51. Тираж 100 экз. Заказ 181

ООО Издательско-полиграфический центр
«Научная книга»
394018, г. Воронеж, ул. Никитинская, 38, оф. 308
Тел. +7 (473) 211-05-55, 229-78-68
<http://www.n-kniga.ru>. E-mail: zakaz@n-kniga.ru

Отпечатано в типографии ООО ИПЦ «Научная книга».
394026, г. Воронеж, Московский пр-т, 11/5
Тел. +7 (473) 229-32-87
<http://www.n-kniga.ru>. E-mail: nautyp@yandex.ru