

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М. В. Ломоносова

XXIX Международная конференция
студентов, аспирантов и молодых ученых
по фундаментальным наукам



Международный
молодежный научный форум

“ЛОМОНОСОВ–2022”

Секция **“ФИЗИКА”**

Подсекция
“ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА”

Сборник тезисов докладов

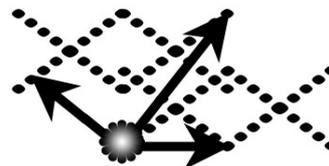
МОСКВА
Физический факультет МГУ
2022

ПОДСЕКЦИЯ «ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА»

Fabrication of hydrophobic surfaces of aluminum alloys by laser irradiation	541
Abramov A., Samyshkin V., Halimov N., Essaka S., Osipov A., Kutrovskaya S.....	541
Электронная и локальная атомная структура соединений TiH_2 и Ti_2AlC	542
Аверкиев И.К.	542
Определение ширины запрещенной зоны и распределения плотности электронных состояний в органическом полупроводнике	543
Арутинов Н.Э.....	543
Радиопоглощающие свойства многокомпонентных твердых растворов на основе BFO-PFN в СВЧ-диапазоне	544
Астафьев П.А.....	544
Исследование гибридных железосодержащих наноструктур на основе клеток ESCHERCHIA и Белка DPS.....	545
Беликов Е.А.....	545
Исследование физико-химических процессов на межфазных границах системы Si/SiO ₂ /HfO ₂ /TiN при высокотемпературном отжиге и легировании примесями сегнетоэлектрического HfO ₂	547
Бугаев А.В., Конашук А.С., Филатова Е.О.	547
Регистрация резонансных частот плазмонных осцилляций 2ДЭГ в трех КЯ $In_xGa_{1-x}N/GaN$ методом THz-TDs спектроскопии.....	548
¹ Бурмистров Е.Р., Авакянц Л.П.....	548
Спин зависимое рассеяние электронов в модифицированных твердых растворах на основе манганита лантана- висмута.....	549
Волков Д.В.	549
Машинное обучение для определения архитектуры ансамблей биметаллических PtCu наночастиц на основании радиальных функций распределения атомов	550
Гладченко Я.Н., Толчина Д.Б.	550
Мёссбауэровская спектроскопия твердых растворов системы $(1-x)PbFe_{1/2}Nb_{1/2}O_3-xPbFe_{2/3}W_{1/3}O_3$	551
Глазунова Е.В., Кубрин С.П., Вербенко И.А.	551
Образование метастабильного силицида при кристаллизации наночастиц Si-Al	552
Гордеев И.С., Колотова Л.Н., Стариков С.В.	552
Влияние параметров поверхности на оптическое пропускание монокристаллов германия и кремния.....	552
Гугуцидзе К.А, Мариничева К.А.	552
Диэлектрические свойства керамики $Ca_{0.3}Ba_{0.7}Nb_2O_6$ модифицированной $SrTiO_3$, $KTaO_3$ и $LiTaO_3$	554
Гусева О.С., Малышкина О.В., Митченко А.....	554
Исследование концентрации носителей заряда в образцах p-n SiC, облучённых электронами с различными дозами.....	555
Двоеглазов Р.А., Соломникова А.В., Зубков В.И.	555
Особенности локальной атомной структуры лантаноборатных и сурьмяно-силикатных стекол с различным содержанием компонент	557
Ермакова А.М., Сухарина Г.Б., Алексеев Р.О., ³ Тригуб А.Л., Велигжанин А.А., Шахгильдян Г.Ю., Волошановская А.С., Авакян Л.А., Бугаев Л.А., ² Сигаев В.Н.	557
Получение гетероструктур STO/Si и BFO-PFN/STO/Si.....	558
Жидель К.М.	558
Низкоэнергетическое ионное ассистирование как способ управления структурой a-CH:Ag покрытий	559

Завидовский И.А., Стрелецкий О.А., Нишак О.Ю., Хайдаров А.А.	559
Структура, магнитные и электронные свойства наночастиц ядро@двойная оболочка Fe ₇ C ₃ /Fe _x O _y /C	560
Заяханов В.А., Фунтов К.О.	560
Исследование механизма образования дефектов на поверхности графита методами атомно- силовой микроскопии.	561
Иванов О.В.	561
Измерения диодов с S-образной характеристикой виртуальным прибором PXI.....	562
Ивкин Л.И., Яковлев Г.Е., Зубков В.И.	562
Исследования электрофизических свойств гранулированных нанокомпозитов (Co ₄₅ Fe ₄₅ Zr ₁₀) _x (MgF ₂) _{100-x}	563
Ивков С.А., Домашевская Э.П., Середин П.В., Голощапов Д.Л., Барков К.А.	563
Особенности физико-химического состояния поверхности и границ раздела структур наночастиц меди для биосенсорики	565
Какулия Ю.С., Паринаова Е.В.	565
Исследование структуры и фазового состава нанокомпозитных пленок W _x Si _{1-x}	567
Керсновский Е.С., Хыдырова С. Михайлова И.В., Васильев Д.Д., Моисеев К.М., Барков К.А., Ивков С.А., Буйлов Н.С.	567
Синтез цилиндрических магнитных наночастиц для их использования в полимерных композитах.	568
Кессель Д.Э., Шibaев А.В. Швец П.В., Камышинский Р.А., Орехов А.С., Абрамчук С.С., Хохлов А.Р., Филиппова О.Е.	568
Исследование ударной вязкости многослойных полимерных композитов, армированных углеродными нанотрубками	569
Кобзев В.А., Чеченин Н.Г., Авторин С.	569
Особенности создания медной контактной сетки на гетероструктурном ФЭП.....	570
Кочергин А.В., Аболмасов С.Н., Теруков Е.И., Шелопин Г.Г.	570
Термохимическая переработка полиэтилена в сверхкритическом диоксиде углерода.....	571
Кравченко Е.И.	571
Формирование одномерных атомных структур серебра на поверхности платины	572
Кудряшов С.А.	572
Сравнительный анализ морфологии поверхности пластин алмаза и оксида галлия в результате постростовой обработки	573
Курасова К., Соломникова А.В.	573
Исследование проводимости золото-углеродных нанопленок.....	574
Лелекова А.Ф., Халимов Н.А., Эйум Э.С.П.	574
Исследование конструкционных материалов, обращенных к высокотемпературной водородной плазме	575
Лобанова Л.Г.	575
Исследование влияния мезоскопических релаксаций на магнитные свойства поверхностных наноструктур.....	577
Локтионов И.А., Бажанов Д.И.	577
Теоретический анализ частотной зависимости динамической проводимости в LuB ₁₂	578
Макушин М.А., Красиков К.М., Арсеев П.И., Случанко Н.Е.	578
Расчет электронного спектра гетероструктуры MoS ₂ /WS ₂	579
Муксунов Н.Я.	579
Лазерная фрагментация кремниевых микрочастиц в воде нано- и пикосекундными лазерными импульсами	580
Нестеров В. Ю., Шулейко Д. В., Колчин А. В.	580
Синтез и оценка распределения диаметров углеродных нанотрубок в вертикально ориентированном массиве	582
Никитина Е. В., Сим В. С., Лянгузов Н. В.	582
Спектроскопические и микроскопические исследования строения 3D развитой поверхности массивов кремниевых нанонитей	583
А. К. Пелагина, Е. В. Паринаова.....	583

Анализ температурных зависимостей теплоёмкости клатратов седьмого типа на основе фосфора и никеля в температурной области 2 — 300 К.....	585
К.С. Пилипенко, А.В. Матовников, Н.В. Митрошенков, А.В. Шевельков, В.В. Новиков	585
Рентгеноструктурный анализ на станции РСА/Белок на примере структуры комплекса цинка с N-[2-(гидроксиалки-лиминометил)фенил]-4-метилбензолсульфоамида.....	585
В.А. Поспелов	585
Изучение процесса перемешивания слоев в многослойных структурах на основе пары материалов W/Be.....	587
Сахоненков С.С., Филатова Е.О.....	587
Определение параметров сверхтонкого взаимодействия монокристаллов бората железа FeVO ₃	589
Снегирёв Н.И., Старчиков С.С.	589
Исследование термической стабильности и окислительных процессов в многослойных рентгеновских зеркалах на основе Mo/Be.....	590
Соломонов А.В., Каратаев А.В., Гайсин А.У., Филатова Е.О.	590
Изучение свойств фрустрированных магнетиков Tb ₂ Ti ₂ O ₇ и (Y _{0.95} Er _{0.05}) ₂ Sn ₂ O ₇	591
Спиридонова А.В.....	591
Влияние фазового состава и тонкой атомной структуры на функциональные характеристики хромовых покрытий	593
Суляндзига Д.А., Жариков В.И.	593
МСr-функционализированный графен для каталитических применений.....	595
Суханова Е.В., Попов З.И.	595
Изучение нанобиогридного материала «клетки фибробласты мышцы – наночастицы кремния» синхротронными методами для биомедицинского применения	597
Титова С.С., Цурикова У.А., Парина Е.В.	597
Исследование структуры и магнетизма малослойных кластеров нанографена в углеродных микро- и нано-сферах допированных азотом	598
Толчина Д.Б., Авакян Л.А., Манукян А.С., Козаков А.Т. Чумаков Р.Г., Емельянов А.В. ⁴ , Сысякян Н., Гюласарян А., Бугаев Л. А.	598
Влияние молекулярного допирования на перенос заряда и электролюминесценцию двумерных органических полупроводников	599
Федоренко Р.С.	599
Эффект Холла в Lu _x Mn _{1-x} S	600
Харьков А.М., Ситников М.Н., Гельгорн А.В., Рунов Р.В.	600
Структура карбиноподобных пленок и их применение в качестве резистивных газовых сенсоров.....	601
Шилов М.С., Стрелецкий О.А., Нищак О.Ю., Завидовский И.А.	601
Гидрофобные покрытия на основе кремнийорганических соединений, нанесенные на волокна хлопка из сверхкритического диоксида углерода.....	603
Шуневич В.А.	603
Micromagnetic simulation of magnetic properties of exchange-coupled Nd ₂ Fe ₁₄ B/ α -Fe nanocomposites	604
Semaida A.M.....	604



FABRICATION OF HYDROPHOBIC SURFACES OF ALUMINUM ALLOYS BY LASER IRRADIATION

Abramov A.¹, Samyshkin V.¹, Halimov N.¹, Essaka S.¹, Osipov A.¹, Kutrovskaya S.^{1,2,3}

¹*Department of Physics and Applied Mathematics, Stoletov Vladimir State University, 600000 Gorkii street, Vladimir, Russia*

²*School of Science, Westlake University, 18 Shilongshan Road, Hangzhou 310024, China*

³*Institute of Natural Sciences, Westlake Institute for Advanced Study, 18 Shilongshan Road, Hangzhou 310024, China*

Abstract — Laser modification of aluminum alloys with inclusions of B₄C microparticles is of significant interest due to a significant increase in strength and temperature characteristics of the obtained material. In the process of laser irradiation of a composite material with an aluminum matrix, it is possible to form cluster objects that change the density of alloying additives distribution on the surface. In this work, we propose the creation of hydrophobic surfaces with macrogeometry controlled by the laser beam trajectory, and microgeometry determined by the target surface modification processes during local laser heating

Keywords— laser modification, hydrophobic surface, contact angle

Surface wettability control has attracted increased research attention due to a wide range of applications, from domestic innovations, such as self-cleaning glass, to high-tech fields such as microfluidic control, corrosion resistance, fluid separation, and resistance reduction. Research into the creation and preparation of highly wettable surfaces has opened up the possibility of using them for fluid transport and smart sensor devices.

Aluminum alloys are used in various industries due to the unique combination of qualities: low density with high values of specific strength, corrosion resistance and thermal conductivity. In terms of strength and fluidity-to-density ratio, strong aluminum alloys surpass low-carbon and low-alloy steels and titanium and are inferior only to high-strength high-alloy steels and titanium alloys.

Laser texturing is a promising method for the fabrication of hydrophobic surfaces due to its potentially high fabrication speed, low waste, and one-step processing without the need for masks. the possibility of creating hydro- and superhydrophobic metal surfaces for real industrial applications using nanosecond fiber lasers is an urgent applied problem.

Here we develop a procedure for forming hydrophobic surfaces. Our surfaces are based on changing the topography of aluminum composites with the addition of boron carbide particles.

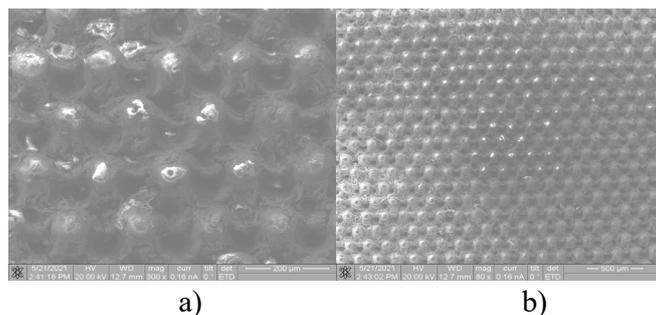


Figure 1. SEM images of the sample surface after action of a laser beam moving on hexagonal trajectories

YAG:Nd laser source was used to texture a composite target surface. The typical parameters of laser action: the exposure time - 10; 10 ns - pulse duration with repetition frequency of $f = 100$ kHz; the pulse power is about 10 W. During laser processing we have applied two options in laser track microgeometry as hexagonal and circular are. As a result the formation of different microstructures on a surface takes place.

As a result of the laser processing the formation of different microstructures on a surface takes place.

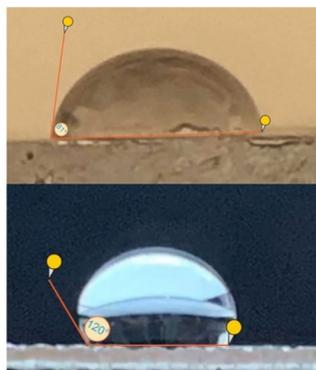


Figure 2. The optical images of the surface testing before laser field action on hydrophobic feature in time

Determination of the boundary wetting angle was carried out by the lying drop method. Before treatment, the edge wetting angle of the sample was 81° . For all treated samples an increase of the marginal wetting angle to values exceeding 90° was detected, i.e. hydrophobization took place after surface structuring by laser irradiation. The highest value of the marginal angle was 120° . Based on the results obtained, we can conclude that the above samples were more consistent with the Wenzel model, and the change in surface texture has a positive effect on the hydrophobic properties of the aluminum and boron carbide alloy.

Acknowledgment

This work is supported by RFBR grant 20-21-00038. A.O. acknowledges support from the Ministry of Science and Higher Education within the State assignment Vladimir State University, project No. 0635-2020-0013.

References

1. Milles, S.; Voisiat, B.; Nitschke, M.; Lasagni, A.F. Influence of roughness achieved by periodic structures on the wettability of aluminum using direct laser writing and direct laser interference patterning technology. // *J. Mater. Process. Technol.*, – 2019, Vol. 270, P. 142–151.
2. Kucherik A., Samyshkin V., Prusov E., Osipov A., Panfilov A., Buharov D., Arakelian S., Skryabin I., Kavokin A. V., Kutrovskaya S., Formation of fractal dendrites by laser-induced melting of aluminum alloys. // *Nanomaterials*, - 2021, 11, 1043.

ЭЛЕКТРОННАЯ И ЛОКАЛЬНАЯ АТОМНАЯ СТРУКТУРА СОЕДИНЕНИЙ TiH₂ И Ti₂AlC

Аверкиев И.К.

Удмуртский федеральный исследовательский центр УрО РАН,

Ижевск, Россия

E-mail: averkiev1997@mail.ru

Известно, что спектроскопия потерь энергии электронов (EELS – Electron Energy Loss Spectroscopy) является мощным аналитическим инструментом для исследования соединений состоящих из легких элементов. Информацию можно извлечь как из спектров с малыми потерями энергии падающих электронов, так и из спектров возбуждения

характеристических краев, однозначно определяющих химический состав исследуемого образца, и из наблюдаемой за краями характеристических потерь, протяженной тонкой структуры потерь энергии электронов.

В области малых потерь энергии электронов реализована спектроскопия потерь энергии валентных электронов (VEELS – Valence Electron Energy Loss Spectroscopy) которая предоставляет информацию, аналогичную ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии, и содержит сведения о зонной структуре. Кроме характерных пиков плазменных потерь, данная область отображает плотность незанятых состояний над уровнем Ферми.

Спектры протяженных тонких структур энергетических потерь электронов (EXELFS – Extended Electron Energy Loss Fine Structure) формируются за краем возбуждения внутреннего уровня атома вещества в результате когерентного рассеяния вторичного электрона на локальном окружении возбуждаемого атома и поскольку природа формирования аналогична EXAFS спектрам (Extended X-ray Absorption Fine Structure), она содержит информацию о параметрах локальной атомной структуры исследуемого объекта – длины химической связи, координационные числа и параметры дисперсии межатомных расстояний.

В работе методами VEELS и EXELFS проведено исследование электронной и локальной атомной структуры соединений TiH_2 и Ti_2AlC . Были получены спектры энергетических потерь электронов в режиме обратного отражения от поверхности образцов в диапазоне до 600 эВ в шкале потерь энергии вторичного электрона. В результате анализа протяженной тонкой структуры были получены параметры локальной атомной структуры, а именно межатомные расстояния между атомами Ti-Ti, Ti-H, Ti-Al, Ti-C, C-C, C-Al, соответствующие координационные числа и фактор Дебая-Валлера. Анализ области малых потерь энергии электронов позволил определить особенности электронной структуры соединений, а именно энергию объемных и поверхностных плазмонов. Для соединения TiH_2 определена энергия межзонных переходов между уровнями H-1s и Ti-3d.

Благодарность выражается научному руководителю к.ф.-м.н. Бакиевой Ольге Ринатовне. Работа выполнена в рамках государственного задания №121030100002-0. Исследования выполняли с использованием оборудования ЦКП “Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий” УдмФИЦ УрО РАН

Литература

1. Herrera-Pérez G., Ornelas-Gutiérrez C., Reyes-Montero A. et al. Complex dielectric function and opto-electronic characterization using VEELS for the lead-free BCZT electroceramic perovskite// *Micron*. 2021. V. 149. P. 103124.
2. Averkiev I. K., Bakieva O. R., Nemtsova O. M. et al. Changes in the chemical compound and local atomic structure of ultrathin surface layers of Fe due to implantation of argon and oxygen ions// *Applied Surface Science*. 2021. V. 539. P. 148243

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ И РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ОРГАНИЧЕСКОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ

Арутинов Н.Э.

*Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), ФЭФМ, Москва, Россия
E-mail: kintiri1997@gmail.com*

При исследовании новых органических полупроводников необходимо выявить влияние структуры на оптические и электрические свойства материала. Это влияние можно

оценить, определив ширину запрещенной зоны и распределение плотности электронных состояний в тонкопленочной структуре. Для решения задачи была экспериментально изучена спектральная зависимость фототока методом постоянного фототока (МПФ) [1].

Применив гауссову аппроксимацию [1] к спектральной зависимости коэффициента поглощения органического полупроводника 2-((5-(4-пентадецил-4*H*-тиено[3,2-*b*]индол-2-ил)тиофен-2-ил)метил)бензо[*b*]тиено[2,3-*d*]тиофен-3(2*H*)-он, полученной в эксперименте МПФ (Рис.1), определены значения ширины запрещенной зоны (2,3 эВ) и дисперсии плотности распределения электронных состояний (0,14 эВ), контролирующей фотопроводимость. Ширина запрещенной зоны является ключевым параметром для определения возможности применения материала в роли генерирующего слоя, и также может быть определена методами, описанными в [2, 3]. МПФ, как показано, позволяет более точно определять искомые энергетические параметры материала. В работе обсуждаются особенности МПФ и энергетические характеристики тонкопленочного фотоэлектрического устройства.

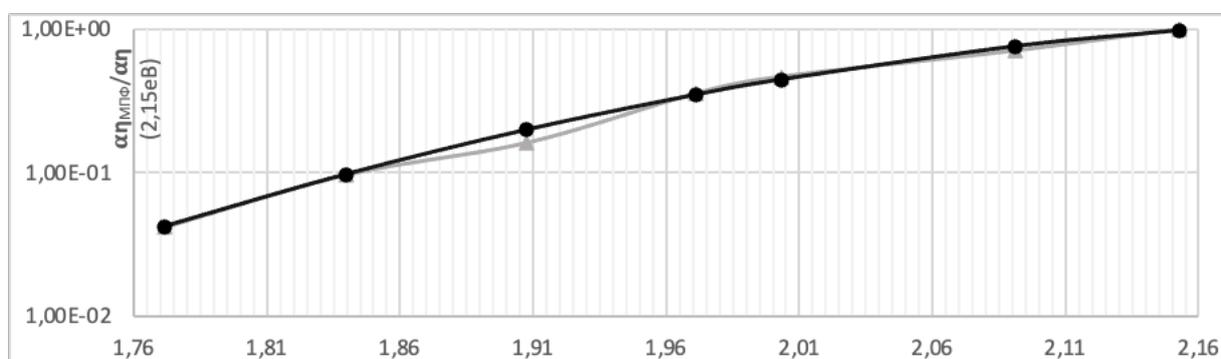


Рис. 1. Сопоставление экспериментального и расчетного спектров коэффициента поглощения, полученных МПФ

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект №21-19-00853).

Литература

1. Малов В.В., Тамеев А.Р., Новиков С.В., Хенкин М.В., Казанский А.Г., Ванников А.В. Гауссова аппроксимация спектральной зависимости коэффициента поглощения в полимерном полупроводнике // Физ. техн. полупроводн. 2016. Т.50, №4. С.489.
2. Арутинов Н.Э., Александров А.Е., Степарук А.С., Тамеев А.Р. Фотопроводимость и электронная структура тиено[3,2-*b*]индола // Труды 63-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 23–29 ноября 2020 года. Электроника, фотоника и молекулярная физика. — Москва: МФТИ, 2020. С.365
3. Арутинов Н.Э., Александров А.Е., Степарук А.С., Тамеев А.Р. Определение ширины запрещенной зоны в органических полупроводниках // Труды 62-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 18–24 ноября 2019 года. Электроника, фотоника и молекулярная физика. — Москва: МФТИ, 2019. С.320.

РАДИОПОГЛОЩАЮЩИЕ СВОЙСТВА МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ НА ОСНОВЕ WFO-PFN В СВЧ-ДИАПАЗОНЕ

Астафьев П.А.

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

E-mail: l.b.e.9.w.4.a.9.p@yandex.ru

Сегнетоэлектрические и мультиферроидные материалы широко применяются в СВЧ-устройствах, выступая в качестве резонаторов, фильтров, фазовращателей, атте-

нюаторов. Развитие методов синтеза и исследования функциональных материалов приводит к появлению большого разнообразия многокомпонентных систем, которые могут демонстрировать лучшие характеристики в сравнении с однокомпонентным или двухкомпонентными системами. Так, например, материалы на основе антиферромагнетиков (BiFeO_3 , VFO) и мультиферроиков ($\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$, PFN) могут, предположительно, иметь подходящие электрические свойства для применения в диэлектрических резонаторах. Материалы таких устройств должны обладать низкими электромагнитными потерями в как можно более широком диапазоне частот.

Целью настоящей работы было исследование радиопоглощающих свойств многокомпонентных твердых растворов на основе VFO-PFN в СВЧ-диапазоне.

Объектами исследования выступили образцы многокомпонентных твердых растворов состава $0,95(\text{Bi}_{0,05}\text{Pb}_{0,95}\text{Fe}_{0,525}\text{Nb}_{0,475}\text{O}_3) - 0,05\text{GeO}_2$ с различной термодинамической предысторией. При изготовлении материала варьировались температуры спекания и синтеза в пределах 850-1000 С, в некоторых случаях был добавлен дополнительный этап синтеза. Образцы выполнены в форме цилиндров диаметром $12 \pm 0,1$ мм и высотой $1 \pm 0,05$ мм.

Измерения проводились при помощи векторного анализатора цепей P9375A "Keysight". Образцы помещались на отрезок микрополосковой линии. Расчеты проводились согласно методике, описанной в [1].

Исследования показали, что в диапазоне частот 2,5 – 10 ГГц уровень коэффициента поглощения в среднем составляет -5 дБ. В области более низких частот коэффициент поглощения достигает -20 дБ. У всех образцов дисперсия коэффициента отражения отличалась незначительно, что свидетельствует об отсутствии или малой степени взаимосвязи микроструктурных различий образцов и радиопоглощающих свойств.

Полученные результаты помогут в будущих исследованиях и выборе составов для дальнейшей разработки СВЧ-устройств.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю д.ф.-м.н. Резниченко Л.А. за помощь в проведении настоящего исследования.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № (0852-2020-0032)/(БА30110/20-3-07ИФ)).

Литература

1. Рейзенкинд Я.А., Клещенков А.Б., Лерер А.М., Нойкин Ю.М. Сравнительная экспресс-оценка потерь энергии электромагнитного поля в электрически активных материалах с помощью микрополосковой линии. Ростов-на-Дону; Таганрог: Изд-во Южного федерального ун-та. 2021.

ИССЛЕДОВАНИЕ ГИБРИДНЫХ ЖЕЛЕЗОСОДЕРЖАЩИХ НАНОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ КЛЕТОК *ESCHERICHIA* И БЕЛКА DPS

Беликов Е.А.

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

E-mail: bp4nth3r@mail.ru

Исследование и применение гибридных нанообъектов является одним из главнейших направлений в науке. Ключом к разработке и созданию недорогих и энергоэффективных устройств может стать использование гибридных наноструктур. Примером таких объектов являются бактериальные культуры *Escherichia coli*, которые можно легко синтезировать в лабораторных условиях. В процессе синтеза данных бактериальных культур можно получать уникальный по своим свойствам гибридный нанообъект –

бактериоферритин Dps, состоящий из органической оболочки и минерализованного ядра. Неорганическое ядро, включающее в себя ионы Fe^{3+} , представляет широкий научный и практический интерес. Исследования гибридных объектов являются крайне актуальными, но важно также получить данные об их источнике – клетках *Escherichia coli*, включая исследования поверхности (мембраны) при интеграции с неорганическими наночастицами, ее физико-химического состояния и морфологии. Удобными инструментами являются сканирующая электронная микроскопия (Scanning Electron Microscopy - SEM), которая может быть успешно применена для изучения морфологии объектов биологического происхождения. В то же время данные о физико-химическом состоянии поверхности могут быть получены при помощи набора рентгеноэлектронных методов, например, фотоэлектронной спектроскопии (XPS - X-ray photoelectron spectroscopy), которая крайне чувствительна к локальному окружению атомов заданного сорта. Сочетание двух таких подходов в рамках единого эксперимента позволит получать "точечную" информацию об атомном и электронном строении, а также морфологии малых объектов, в том числе клеток, что крайне актуально. Фотоэмиссионная электронная микроскопия (PhotoEmission Electron Microscopy - PEEM), которая в сочетании с лабораторными или синхротронными источниками возбуждения является одним из таких спектроскопических методов. Важным критерием для исследований биологических объектов методом PEEM является их устойчивость к особым специфическим условиям выполняемых экспериментов: сверхвысокий вакуум, радиационное поражение и высокие напряжения.

В данной работе представлены результаты PEEM исследований клеток *E.coli* K12 MG1665 в сочетании с контролем свойств методами SEM и XPS. При этом SEM исследования проводились до и после измерений XPS и PEEM. Также показаны результаты исследований методом XPS мембраны клеточной культуры. Исходные пробы осаждались на чистые подложки кремния и хранились в лабораторных условиях. Измерения XPS проводились при Al K α возбуждении (1486.61 eV), в ходе контрольных измерений SEM использовалось ускоряющее напряжение от 2,5 до 20 кВ. Получение изображений методом PEEM производилось при излучении ртутной лампы ~5 эВ.

Данные, полученные при SEM исследованиях исходных клеток *E.coli* показали четко детектируемое распределение клеток по всей подложке. Также были зафиксированы изображения поверхности отдельных клеток с высоким разрешением. Контрольные измерения XPS не выявили каких-либо загрязнений поверхности, а также показали наличие всех компонентов, свойственных осажденной клеточной культуре, и остаточным следам буферного раствора. Данные PEEM продемонстрировали возможность эффективного получения изображений биообъектов: массива клеток *E.coli*. Полученные PEEM изображения отдельных клеток хорошо соотносятся с данными, полученными при применении метода SEM. Исследования SEM, проведенные после XPS и PEEM экспериментов, продемонстрировали лишь частичную деградацию мембраны бактерии. Проведенные в дальнейшем исследования XPS показали наличие ионов железа в различных состояниях как внутри клеточной культуры, так и в мембранной области. Полученные результаты показывают дальнейшую перспективу проведения эффективных синхротронных исследований для химически-селективного микроскопического анализа поверхности массива клеток.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта 19-72-20180) и Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351 в части методических вопросов синхротронных исследований.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ НА МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦАХ СИСТЕМЫ $\text{Si}/\text{SiO}_2/\text{HfO}_2/\text{TiN}$ ПРИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОМ ОТЖИГЕ И ЛЕГИРОВАНИИ ПРИМЕСЯМИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО HfO_2

Бугаев А.В., Конашук А.С., Филатова Е.О.

*Санкт-Петербургский Государственный Университет, физический факультет, Санкт-Петербург, Россия
bugaev.sasha99@mail.ru*

В большинстве случаев HfO_2 является обычным диэлектриком. Однако, путём легирования примесью, либо создания внутреннего напряжения в плёнке в результате осаждения электродов с последующим отжигом можно добиться образования в его кристаллической структуре нецентросимметричной орторомбической кристаллической модификации. Известно, что следствием данного процесса является возникновение сегнетоэлектрических свойств в плёнке HfO_2 , которое проявляется в появлении остаточной поляризации [1]. Сегнетоэлектрический FE-HfO_2 может быть крайне полезен в полевом транзисторе (FE-FET) в качестве активного слоя, где направление остаточной поляризации FE-HfO_2 задаёт пороговое напряжение транзистора. Такой полевой транзистор состоит из трёх основных слоёв — диэлектрик/сегнетоэлектрик/металл, что соответствует изучаемой в данной работе системе $\text{Si}/\text{SiO}_2/\text{FE-HfO}_2/\text{TiN}$, где слой Si используется в качестве подложки. Крайне важны в формировании и стабилизации сегнетоэлектрической кристаллической фазы процессы, происходящие на межфазных границах $\text{SiO}_2/\text{HfO}_2$ и HfO_2/TiN [2]. Поэтому их изучение является первостепенной задачей в исследовании представленной системы.

Основной целью данной работы является изучение влияния температурного отжига и легирования примесью системы $\text{Si}/\text{SiO}_2/\text{HfO}_2/\text{TiN}$ на формирование межфазных границ ($\text{SiO}_2/\text{HfO}_2$ и HfO_2/TiN) и на процессы, протекающие на них. Образцы представляют собой многослойную структуру $\text{Si}/\text{SiO}_2(7,5 \text{ нм})/\text{FE-HfO}_2(9,5 \text{ нм})/\text{TiN}(10 \text{ нм})$. Некоторые из образцов были подвержены температурному отжигу при температурах 850°C и 1000°C . Также часть образцов была легирована примесью Si (3,6%) и Al (5,5%). Все измерения проводились методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии высоких энергий в центре синхротронного излучения Petra III на канале вывода синхротронного излучения P22. В ходе эксперимента были использованы несколько энергий возбуждающих фотонов (2800 эВ, 5000 эВ и 7000 эВ), и углов эмиссии фотоэлектронов (5° , 45° и 60°). Фотоэлектронные спектры были разложены при помощи компьютерных программ CASA XPS и AAnalyser. Также, для подкрепления результатов, полученных из анализа фотоэлектронных спектров, некоторые образцы были исследованы методами рентгеновской дифракции и просвечивающей электронной микроскопии.

В ходе проведённых исследований было выявлено перемешивание слоёв FE-HfO_2 и TiN с образованием TiO_xN_y и HfN_x . Обнаружено, что в результате температурного отжига происходит перераспределение кислородных и азотных вакансий на границе $\text{FE-HfO}_2/\text{TiN}$, причём с ростом температуры вымывание кислорода из оксида гафния металлом резко уменьшается. Влияние наличия/отсутствия примесей в активном слое на перераспределение атомов кислорода и азота на данной межфазной границе обнаружено не было. Таким образом, данный процесс определяется исключительно температурой отжига. Анализ фотоэлектронных Hf4f спектров обнаруживает смещение дублета, соответствующего HfO_2 в сторону больших энергий связи с ростом температуры отжига, что говорит об уменьшении эффективной работы выхода электрода [3].

Отжиг системы также значительно активизирует процессы, происходящие на межфазной границе $\text{SiO}_2/\text{FE-HfO}_2$. Происходит образование протяжённого (2,5 нм) слоя HfSi_xO_y . Стехиометрия данного соединения зависит от температуры отжига. С ростом температуры HfSi_xO_y становится более обогащённым гафнием, на что указывает смещение соответствующего пика на спектре Si2s в сторону меньших энергий связи. Этот

вывод подтверждается данными просвечивающей электронной микроскопии. Легирование примесями несколько снижает долю HfSi_xO_y . Данные рентгеновской дифракции показывают, что образец, легированный алюминием, демонстрирует наличие в своей структуре сегнетоэлектрической орторомбической кристаллической фазы в отличие от образцов, легированных кремнием, в которых доминирующей является центросимметричная тетрагональная кристаллическая модификация.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ МК-3870.2022.1.2.

Литература

1. M. Hoffmann, U. Schroeder, T. Schenk et al. "Stabilizing the ferroelectric phase in doped hafnium oxide", *J. Appl. Phys.* 118, 072006 (2015) (doi: 10.1063/1.4927805).
2. Johannes Mueller, Stefan Slesazek, Thomas Micolajick et al. "Ferroelectric Field Effect Transistor", Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials, 2019, Pages 451 – 471.
3. E. Lipp, H. J. Osten, and M. Eizenberg et al. "The role of metal\high-k dielectric interfaces in advanced gate stacks", *J. Appl. Phys.* 106, (2009), 113505.

РЕГИСТРАЦИЯ РЕЗОНАНСНЫХ ЧАСТОТ ПЛАЗМОННЫХ ОСЦИЛЛЯЦИЙ 2ДЭГ В ТРЕХ КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GAN}$ МЕТОДОМ THZ-TDS СПЕКТРОСКОПИИ

¹Бурмистров Е.Р., Авакянц Л.П.

*МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра общей физики,
Москва, Россия*

E-mail: ¹eugeni.conovaloff@yandex.ru

Гетероструктуры $\text{InGaN}/\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ представляют большой интерес в связи с их широким практическим использованием [1]. Например, УФ светодиоды с активной средой на основе гетероструктуры $\text{InGaN}/\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ с множественными квантовыми ямами (МКЯ) обладают 40%-ной эффективностью излучения [2]. Однако выходная мощность и эффективность излучения приборов микро – и оптоэлектроники на основе гетероструктур $\text{InGaN}/\text{AlGaIn}/\text{GaIn}$ определяются подвижностью и временем релаксации двумерного электронного газа (2ДЭГ) в квантовых ямах (КЯ) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaIn}$.

Целью данной работы является регистрация методом терагерцовой спектроскопии с временным разрешением (THz-TDs) резонансных частот плазмонных осцилляций, возбуждаемых в образцах гетероструктур с тремя КЯ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaIn}$ лазерными импульсами длительностью 130 фс в диапазоне температур от 90 до 170К. Быстрое преобразование Фурье (БПФ) осциллограммы электрического поля ТГц сигнала позволило получить частотные спектры мощности и фазы ТГц излучения, интерпретация которых дала возможность оценить время релаксации импульса (которое составило ~ 10 -12 с), подвижность ($\mu = 4 \cdot 10^3 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$) и эффективную массу ($m^* = 0.45 m_e$) 2ДЭГ в исследованных гетероструктурах. С помощью серии частотных спектров мощности и фазы ТГц излучения были получены температурные зависимости эффективной массы и времени релаксации импульса 2ДЭГ. Значение подвижности 2ДЭГ, полученное методом THz-TDs, хорошо согласуется с данными холловских измерений.

Литература

1. Олешко В.И., Горина С.Г. // Ученые записки физического факультета. 2015. Т. 5. № 155501. С. 1 – 8.
2. Мокеров В.Г. и др. // ФТП. 2009. Т. 43. № 4. С. 561-567.

СПИН ЗАВИСИМОЕ РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ В МОДИФИЦИРОВАННЫХ ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ НА ОСНОВЕ МАНГАНИТА ЛАНТАНА-ВИСМУТА

Волков Д.В.

*Южный федеральный университет, НИИ физики, Ростов-на-Дону, Россия**E-mail: dvvolkov@srfedu.ru*

В физике магнитоэлектрических явлений идет поиск различных сред, обеспечивающих тесную взаимосвязь зарядовых и спин-модулированных подсистем. Наиболее перспективным и многогранным в этой связи представляется явление магнитосопротивления. Технически значимые результаты получены при исследовании процессов гигантского и колоссального магнитосопротивления, происходящих в анизотропных пространственно неоднородных и гетероструктурах. Ранее показано, что эффект гигантского магнитосопротивления проявляет себя в различных неоднородных средах со структурой типа перовскита [1-5]. В данной работе изготовлены модифицированные твердые растворы на основе $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_3$ модифицированные оксидом ниобия. Модификацию твердых растворов проводили в соответствии с формулой $\text{Bi}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{Mn}_{1-x}\text{Nb}_x\text{O}_3$. Все объекты исследования получены двухстадийным твердофазным синтезом ($T_1=800\text{ }^\circ\text{C}$, $t=10\text{ ч}$ и $T_2=950\text{ }^\circ\text{C}$, $t=10\text{ ч}$) с последующим спеканием по обычной керамической технологии ($T_{\text{сп}}=1020\text{ }^\circ\text{C}$, $t=2,5\text{ ч}$). Фазовый состав и полноту синтеза контролировали при помощи рентгеновской дифракции на длине волны $\text{CoK}\alpha$, с помощью дифрактометра ДРОН-3. На каждой стадии технологического процесса проводилась поэтапная оптимизация условий образования ТР. Измерения диэлектрических характеристик проводились при $T=80\text{ К}$ и диапазоне частот от 100 Гц до 1 МГц , при помощи прецизионного измерителя импеданса Agilent E4980A. Модифицированные образцы оказались однофазными и беспримесными, а при комнатной температуре имеют кубическую структуру. На спектрах диэлектрической проницаемости присутствуют аномалии, которые ранее наблюдались других систем твердых растворах на основе $\text{Bi}_{1-x}\text{La}_x\text{MnO}_3$ [6]. Предварительные данные указывают на наличие в исследуемом материале значительного отрицательного магнетосопротивления, величина и характер которого позволяют отнести его к колоссальному магнетосопротивлению. В работе обсуждается природа наблюдаемых явлений, их связь с фазовыми состояниями и полиморфизмом объектов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № 0852-2020-0032)/(БА30110/20-3-07ИФ) под руководством директора НИИ физики ЮФУ, д.ф.-м.н, Вербенко И.А. ЦКП НИИ физики ЮФУ.

Литература

1. Husain, Shahid & Bhat, Irshad & Khan, Wasi & Alkhtaby, Lila. Structural and dielectric properties of $\text{La}_{0.8}\text{Te}_{0.2}\text{MnO}_3$. Solid State Communications. 157. 29. (2013).
2. S. Jin, T. H. Tiefel, M. McCormack, R. A. Fastnacht, R. Ramesh, L. H. Chen. Thousandfold Change in Resistivity in Magnetoresistive La-Ca-Mn-O Films. Science 264, 413, (1994).
3. R. Mahesh, R. Mahendiran, A. K. Raychaudhuri, and C. N. R. Rao, Giant magnetoresistance in bulk samples of $\text{La}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$ (A= Sr or Ca). J. Solid State Chem., 114, 297, (1995).
4. A. Seffar, J. Fontcuberta, B. Martlnez, J.L. Garcla-Mufioz, S. Pifiol, X. Obradors Giant magnetoresistance in ceramic perovskites La-L-Ca-MnO (L = Y,ad) J. of Magnetism and Magnetic Materials, 157/158, 260-261, (1996).
5. А.В. Павленко, А.В. Турик, Л.А. Резниченко, Л.А. Шилкина. Магнитодиэлектрический эффект в керамике $\text{Bi}_{1/2}\text{La}_{1/2}\text{MnO}_3$, Письма в ЖТФ, Т39(1), (2013).
6. Y.J. Wu et all Synthesis and dielectric characteristics of $\text{Bi}_{0.5}\text{La}_{0.5}\text{MnO}_3$ ceramics, Applied Physics A. V. 97. P. 191–194. (2009).

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АРХИТЕКТУРЫ АНСАМБЛЕЙ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ РТСU НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВАНИИ РАДИАЛЬНЫХ ФУНКЦИЙ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ АТОМОВ

Гладченко Я.Н., Толчина Д.Б.

*Южный Федеральный Университет, физический факультет,
Ростов-на-Дону, Россия
E-mail: ygl@sfedu.ru*

Мы рассматриваем биметаллические наночастицы Pt-оболочка Cu-ядро, которые являются перспективными катализаторами реакции восстановления кислорода с активностью, сравнимой с активностью, достигаемой при использовании монометаллических частиц Pt. В то же время частицы ядро-оболочка более дешевые по сравнению с чисто платиновыми частицами, а также обладают более высокой стабильностью в процессе реакции. Ещё большее повышение стабильности может быть достигнуто в так называемых «градиентных» наночастицах с плавным переходом компонентов в области границы раздела ядра и оболочки [1].

Идентификация структуры (или «архитектуры») биметаллических наночастиц — непростая задача. Архитектура может варьироваться от смеси независимых частиц, случайного твердого раствора (сплава), ядро-оболочки и градиентных частиц. Различие в архитектуре должно отражаться в парной радиальной функции распределения атомов (РФА), которая, в свою очередь, может быть эффективно измерена методом рентгеновской абсорбционной спектроскопии.

Мы применяем алгоритмы машинного обучения (МО), адаптированные к синтетическим данным РФА, полученным в результате моделирования молекулярной динамики наночастиц разного размера, состава и архитектуры.

Мы показали высокую чувствительность РФА к архитектуре наночастиц: правильное распознавание достигается в 99% тестовых случаев. Применение МО к РФА, полученным для реальных образцов, дало ожидаемые результаты для частиц ядро-оболочка и градиентных частиц, но показало высокую степень агрегации Pt в частицах сплава PtCu.

В реальных образцах присутствуют наночастицы различного размера и состава — ансамбли наночастиц. В этом случае следует рассматривать не одну единственную радиальную функцию, а их линейную комбинацию с весовыми множителями, соответствующими частоте встречаемости наночастиц в ансамбле. В этой работе выполняется теоретическое исследование влияния различных форм распределений на возможность определения архитектуры наночастиц по средним РФА. Показана достаточно высокая эффективность методов ближайших соседей (KNeighborsClassifier) и нейронной сети (MLPClassifier).

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 20-79-10211. Выражаю особую благодарность моему научному руководителю Авакяну Л. А. д-ру физ.-мат. наук за значимые замечания и важнейшие советы при проведении исследования.

Литература

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

МЁССБАУЭРОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ СИСТЕМЫ
(1- x) $\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ - $x\text{PbFe}_{2/3}\text{W}_{1/3}\text{O}_3$

Глазунова Е.В., Кубрин С.П., Вербенко И.А.

*Научно-исследовательский институт физики, Южный федеральный университет, 344090, Ростов-на-дону, Россия**E-mail: kate93g@mail.ru*

Мультиферроики — это материалы, обладающие как магнитным, так и сегнето-электрическим и/или сегнетоэластическим упорядочениями, обуславливающими связь между намагниченностью и электрической поляризацией [1]. В течение нескольких последних десятилетий они считаются очень перспективными ввиду возможности применения в устройствах для хранения данных с высокой плотностью [2]. Среди мультиферроиков на основе свинца особый интерес представляют $\text{Pb}(\text{Fe}_{2/3}\text{W}_{1/3})\text{O}_3$ (PFW) и $\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ (PFN), которые кристаллизуются преимущественно неупорядоченной сложной структуре перовскита, в которой катионы (Fe^{3+} , Nb^{5+} и W^{6+}) случайным образом распределены по октаэдрическим В-позициям. Значения температур магнитного перехода в них сильно отличаются: $T_N(\text{PFW}) \sim 350$ К $T_N(\text{PFN}) \sim 150$ К, и в твердых растворах (ТР) на их основе ожидается возникновение магнитного перехода при T_N близких к комнатной температуре.

В данной работе представлены исследования магнитной структуры ТР системы

(1- x)PFN – x PFW с $x=0.0$ -1.0 при помощи эффекта Мёссбауэра. Мёссбауэровские исследования показали, что изомерные сдвиги дублетов соответствуют ионам Fe^{3+} в кислородном октаэдрическом окружении [3]. Спектр PFN состоит из двух парамагнитных дублетов, что указывает на неоднородность распределения катионов в В-подрешетке. Мёссбауэровские спектры образцов с $x=0.1$...1.0 представляют собой суперпозиции трех, четырех либо пяти парамагнитных дублетов, которые отличаются значениями квадрупольных расщеплений. В сложных перовскитных оксидах величина квадрупольного расщепления преимущественно обусловлена симметрией локального окружения ионов Fe^{3+} . Чем ниже симметрия локального окружения, тем больше величина квадрупольного расщепления. Согласно величине сверхтонкого магнитного поля (СТП) секстета образцов с $x = 0.7$ - 1.0, измеренных при комнатной температуре определено, что Fe^{3+} имеет различное число немагнитных ионов в ближайшем окружении.

Значения T_N в ТР системы (1- x) PFN - x PFW почти линейно возрастает от 165 К для $x = 0$ до 345 К для $x = 1.0$. Отличие значений T_N от значений, приведенных в литературе, связано с распределением катионов В-подрешетки, то есть повышение T_N в образце PFN, вероятно, обусловлено более высокой степенью катионного беспорядка. Значение же T_N в образце PFW свидетельствует о возникновении локального катионного упорядочения в нем.

Полученные результаты целесообразно использовать при разработке новых материалов на основе ТР системы (1- x)PFN – x PFW.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект №0852-2020-0032/(БА30110/20-3-07ИФ) при использовании оборудования ЦКП «Электромагнитные, электромеханические и тепловые свойства твердых тел» НИИ физики ЮФУ.

Литература

1. N.A. Spaldin, R. Ramesh, Advances in magnetoelectric multiferroics, Nat. Mater. 18, 203–212 (2019).
2. Y. Tokura, Multiferroics as quantum electromagnets, Science 312, 1481–1482 (2006).
3. F. Menil J. Phys. Chem. Solids 46 (7), 763-789 (1985).

ОБРАЗОВАНИЕ МЕТАСТАБИЛЬНОГО СИЛИЦИДА ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ
НАНОЧАСТИЦ SI-ALГордеев И.С.^{1,2}, Колотова Л.Н.³, Стариков С.В.⁴¹*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Объединённый институт высоких температур РАН, Москва, Россия*²*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)», Москва, Россия*³*Национальный исследовательский университет «Высшая школа
экономики», Москва, Россия*⁴*Interdisciplinary Centre for Advanced Materials Simulation, Ruhr-University,
Germany**E-mail: gordeevilu@gmail.com*

Механизм кристаллизации сплава Al-Si из аморфного состояния до сих пор неясен. Несмотря на отсутствие равновесных соединений для этой бинарной системы, существует несколько экспериментальных свидетельств, подтверждающих образование метастабильного силицида при отжиге аморфного Si, смешанный с Al. Классификация этой метастабильной структуры является недостающим фрагментом в описании кинетики кристаллизации сплава Al-Si. В этой работе были рассмотрены свойства силицида алюминия структуры Al₂Si, которая является вероятным кандидатом на роль метастабильного соединения. Наше исследование было основано на атомистическом моделировании с использованием разработанного недавно межатомного потенциала и подхода DFT. Все использованные методы показали, что существует несколько кристаллических структур Al₂Si с близкой геометрией и относительно низкими энергиями образования. Химический порядок в таких структурах аналогичен порядку в расплаве Si-Al. Мы также показали, что объединение этих структур позволяет формировать кристалл с разной степенью упорядоченности.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПОВЕРХНОСТИ НА ОПТИЧЕСКОЕ ПРОПУСКАНИЕ
МОНОКРИСТАЛЛОВ ГЕРМАНИЯ И КРЕМНИЯ

Гугуцидзе К.А, Мариничева К.А.

*Тверской государственный университет, физико-технический факультет,
Тверь, Россия**E-mail: gugutsidze123456@mail.ru*

На выбор материалов инфракрасной оптики влияет большое число факторов, таких как физико-механические свойства, стойкость к воздействию различных сред, обрабатываемость, обеспечение требуемого качества поверхности и т. д. Основными оптическими характеристиками материалов, являются: спектральное пропускание и отражение, показатель преломления; коэффициенты поглощения и ослабления излучения [1-3].

Актуальность настоящей работы определяется востребованностью монокристаллов германия и кремния высокого качества в ИК-оптике. Различные способы обработки этих кристаллов позволяют получать оптические поверхности высоких классов чистоты. Исследование полученных поверхностей на шероховатость современными методами и средствами позволяет провести уточнение и выявление оптимальных способов обработки кристаллов для ИК-оптики.

Цель работы- исследование влияния способов обработки оптических элементов и параметров их поверхностей на пропускание монокристаллических образцов германия в диапазоне (1.5-25 мкм) и монокристаллических образцов кремния в диапазоне (1.2-7 мкм).

Исследования проводились на монокристаллах германия, легированных сурьмой, выращенных способом Чохральского в направлении [111], (удел. сопротивление $\rho=1.0-1.5$ Ом·см; n-тип); монокристаллах кремния, выращенных методом Чохральского [111], ($\rho = 1.9-2.4$ Ом·см, n-тип). Обработка поверхностей состояла из этапов: шлифовка порошками корунда М40-М10; полировка суспензиями алмазного синтетического порошка АСМ 2/0 и АСМ 1/0 на кремниевой подложке (1 способ) и полировка алмазными порошками АМ 0.5/0 на смоле (2 способ). Оценка параметров полученных поверхностей проводилась на оптическом профилометре NanoMap 1000WLI, регистрация спектров пропускания – на Фурье-ИК спектрометре Tenzor 27.

Поверхности оптических элементов характеризуются такими параметрами как среднее арифметическое отклонение профиля (Ra), высота неровностей профиля (Rz), среднеквадратическое отклонение шероховатости поверхности (Rq), Rmax – наибольшее отклонение профиля и др. В результате аттестации исследуемых поверхностей получены 3d-профили поверхностей, карты высот и линейные профилограммы для всех образцов германия и кремния, определены параметры шероховатости (Таб.1).

Таблица 1. Параметры шероховатости для образцов германия и кремния.

Параметры поверхности	Полировка АСМ 2/0, Ge	Полировка АМ 0.5/0, Ge	Полировка АСМ 2/0, Si	Полировка АМ 0.5/0, Si
Ra, нм	3.1	2.7	5.1	4.4
Rz, нм	16.6	12.8	13.1	11.2
Rq, нм	3.7	3.3	4.2	3.4
Rmax, нм	23.2	14.7	18.2	17.5

Оптимальная геометрия поверхности соответствует параметрам образцов германия и кремния, обработанным абразивными суспензиями АМ 0.5/0 на смоляном полировальнике.

Исследования оптического пропускания полированных образцов германия и кремния проводилось на Фурье-ИК спектрометре Tenzor 27 при одинаковой температуре $T = 200^{\circ}\text{C}$. и одинаковой толщине (10 мм), таким образом исключалось внесение ошибки в измерения. На рисунке 1 представлены спектры пропускания монокристаллов германия и кремния, обработанных различными абразивными суспензиями на различных подложках.

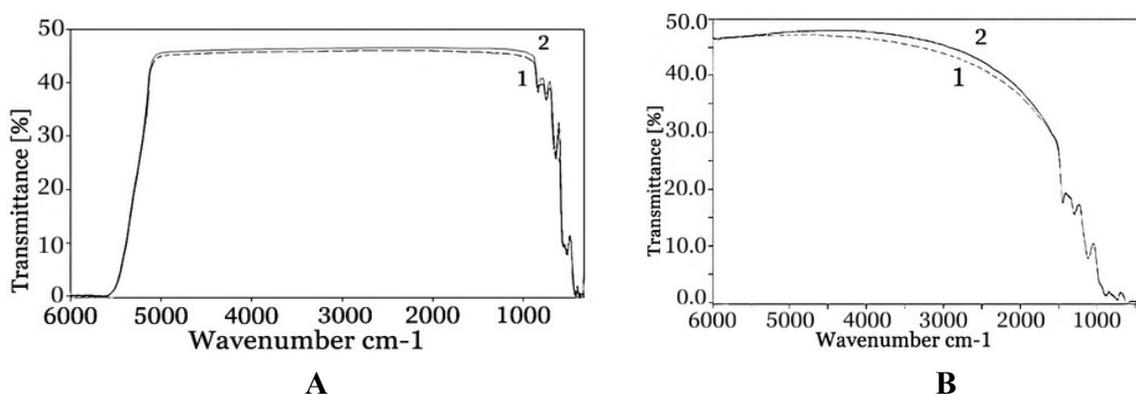


Рис.1. А Спектры пропускания образцов германия В и кремния, обработанных двумя способами.

Были определены коэффициенты пропускания исследуемых монокристаллов (таб.2).

Таблица 2. Коэффициенты пропускания исследуемых монокристаллов.

	Полировка АСМ 2/0, Ge	Полировка АМ 0.5/0, Ge	Полировка АСМ 2/0, Si	Полировка АМ 0.5/0, Si
Коэффициент пропускания, τ %	46.1	46.6	46.8	47.5

Очевидно, что особенности полировки монокристаллов кремния и германия во многом определяют как качество получаемых оптических поверхностей, так и влияют на оптические свойства этих кристаллов. Анализ полученных результатов позволяет сделать вывод о заметном влиянии параметров поверхности на оптическое пропускание образцов, а также решает практическую задачу об оптимизации способов обработки технически ценных кристаллов германия и кремния.

Исследования проведены на оборудовании Центра коллективного пользования Тверского государственного университета.

Литература

1. Иванова А. И., Мариничева К. А., Третьяков С. А., Иванов А. М., Молчанов С. В., Каплунов И.А. Температурная зависимость оптического пропускания монокристаллов германия // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов, Выпуск 13. 2021. С.177-184.
2. Каплунов И.А. Колесников А.И., Гавалян М.Ю., Белоцерковский А.В. Оптические свойства крупногабаритных монокристаллов германия // Оптика и спектроскопия, 2016. Т. 120. № 4. С. 691-696.
3. Claeys C., Simoen E. Germanium-based Technologies: From Materials to Devices. Elsevier. 2007. p. 480.

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИКИ $\text{Ca}_{0.3}\text{Ba}_{0.7}\text{Nb}_2\text{O}_6$ МОДИФИЦИРОВАННОЙ SrTiO_3 , KTAO_3 И LiTAO_3

¹Гусева О.С., ²Малышкина О.В., ²Митчеко А.

¹Тверской государственный медицинский университет, Тверь, Россия

²Тверской государственный университет, Тверь, Россия

В работе методом твердофазного синтеза получены образцы керамики состава $\text{Ca}_{0.3}\text{Ba}_{0.7}\text{Nb}_2\text{O}_6$ (CBN30) чистого и с модифицирующими добавками (5%) SrTiO_3 , KTAO_3 или LiTAO_3 . [1] Проведенные сравнительные исследования (в температурном интервале от комнатной до 300°C) дисперсии диэлектрической проницаемости в частотном диапазоне от 1 Гц до 10МГц показали, что примесь SrTiO_3 приводит к увеличению диэлектрической проницаемости, по сравнению с беспримесной керамикой CBN30 и другими модифицированными составами. Примесь LiTAO_3 дестабилизирует поведение диэлектрических характеристик на частотах выше 100 kHz. [2]

До температур 230°C диэлектрическая проницаемость практически не зависит от частоты. Затем начинается ее рост, обусловленный приближением к температуре сегнетоэлектрического фазового перехода (Рис. 1). Величина диэлектрической проницаемости в максимуме сильно зависит от частоты измерения, уменьшаясь с ростом частоты. У всех составов наблюдается максимум при температуре 278 °С, который не зависит ни от частоты измерения, ни от вида модификатора. Образец CBN30 модифицированный SrTiO_3 имеет дополнительный максимум при температуре 200°C (Рис. 1г).

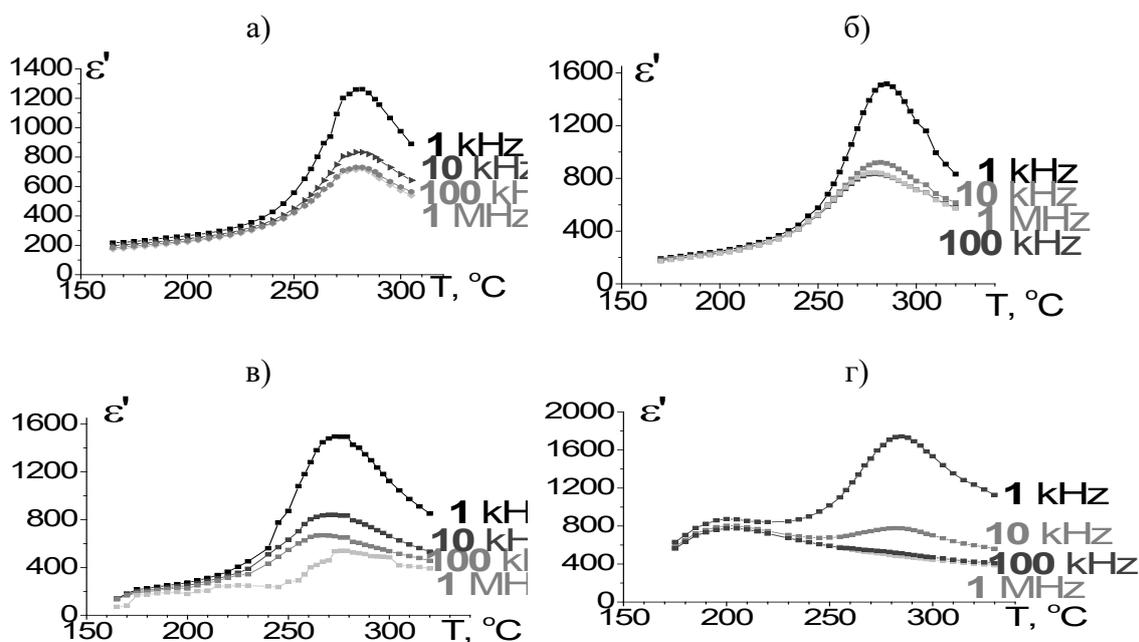


Рис. 1. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости керамик CBN30 чистого (а) и модифицированного KTaO₃ (б), LiTaO₃ (в), SrTiO₃ (г).

Кристаллы CBN имеют структуру типа тетрагональных вольфрамовых бронз, в которой за возникновение спонтанной поляризации ответственны все ионы металлов (для CBN это Ca, Ba и Nb).[3-5] Полученные результаты интерпретируются исходя из того, что ионы, составляющие модифицирующие добавки могут входить в структуру ТТБ, занимая те же позиции, что и ионы CBN.

Литература

1. Okazaki, K. Ceramic engineering for dielectrics / K. Okazaki – Tokyo, 1969.
2. Yingbang Yao, Kailong Guo, Daoguang Bi, Tao Tao, Bo Liang, C. L. Mak, S. G. Lu. Pyroelectric properties of calcium doped strontium barium niobate ceramics Sr_{0.65-x}Ca_xBa_{0.35}Nb₂O₆ (x = 0.05–0.425) // Journal of Materials Science: Materials in Electronics (2018) 29:17777–17785 <https://doi.org/10.1007/s10854-018-9885-3>
3. J. Rodel, K.G. Webber, R. Dittmer, W. Jo, M. Kimura, D. Damjanovic. Transferring lead-free piezoelectric ceramics into application // J. of the European Ceramic Society. 2015, V. 35, Is.6, P.1659
4. B. Malic, J. Koruza, J. Hrescak, J. Bernard, K. Wang, J. Fisher, A. Bencan. Sintering of Lead-Free Piezoelectric Sodium Potassium Niobate Ceramics (Review) // Materials. 2015. V. 8. P. 8117
5. Y. Saito, H. Takao, T. Tani, T. Nonoyama, K. Takatori, T. Homma, et al. Lead-Free piezoceramics // Nature. 2004. V. 432. No 7013. P.84;

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ОБРАЗЦАХ P-N SiC, ОБЛУЧЁННЫХ ЭЛЕКТРОНАМИ С РАЗЛИЧНЫМИ ДОЗАМИ

Двоглазов Р.А., Соломникова А.В., Зубков В.И.

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), факультет электроники, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: rodionrezer@yandex.ru

Особое внимание сейчас уделяется такому широкозонному полупроводнику, как карбид кремния. Этот материал активно используется для создания широкого круга

приборов электроники, в том числе микроустройств, способных выдерживать агрессивные условия окружающей среды. Целью данной работы было изучение влияния дозы облучения электронами на электрофизические характеристики диодов на SiC.

В ходе работы было исследовано четыре образцов-диодов 4H-SiC; р-область структуры была получена путём имплантации атомов бора в подложку n-типа, после чего был проведён отжиг [1]. Далее образцы облучались электронами с энергией 0.9 МэВ, дозы облучения указаны в табл. 1. Исследования проводились на комплексе спектроскопии адмиттанса, состоящем из криогенной зондовой станции Janis CCR-10, измерителя температуры LakeShore 336, и измерителя иммитанса Agilent E4980A. Данный измерительный комплекс является уникальным в России, поскольку реализует измерения методами спектроскопии адмиттанса в широком диапазоне температур $T=25\dots450$ К, напряжений $U=\pm 40$ В и частот тестового сигнала $f=20$ Гц...2 МГц. В комплексе реализовано автоматизированное управление параметрами эксперимента при помощи программного обеспечения LabVIEW. Для получения профилей концентрации основных носителей заряда (ОНЗ) был снят набор вольт-фарадных характеристик (ВФХ) при комнатной температуре в диапазоне частот тестового сигнала $f=10\dots2000$ кГц. Расчёт профилей концентрации ОНЗ производился по формуле [2, с. 29]:

$$n(x) = \frac{C^3}{e\epsilon_0\epsilon S^2} \left(\frac{dC}{dV}\right)^{-1} \quad (1)$$

В табл. 1 приведены средние концентрации ОНЗ n и соответствующие значения ширины области объемного заряда (ООЗ) x , зарегистрированные на частоте 100 кГц.

Таблица 1. Характеристики образцов

	Номер образца			
	1	2	3	4
Доза облучения D , см ⁻²	необлучённый	0.75×10^{14}	1.5×10^{14}	3.0×10^{14}
Концентрация ОНЗ n , см ⁻³	8.05×10^{14}	7.55×10^{14}	4.40×10^{14}	1.40×10^{14}
Ширина ООЗ x , мкм	2.4	2.5	3.3	8.0

Полученные данные позволяют судить об уменьшении величины концентрации свободных носителей заряда при увеличении дозы облучения D . Эту закономерность можно объяснить явлениями компенсации. Интересным зарегистрированным явлением является частотная дисперсия ВФХ образца 4: от 1.0×10^{14} см⁻³ на частоте 1 МГц до 3.0×10^{14} см⁻³ на частоте 1 кГц. Также измерялись температурные спектры проводимости, из них рассчитывалась энергия активации, которая составила приблизительно 130 мэВ, что мы относим к наличию примеси азота в исходной подложке n-типа.

Литература

1. Влияние облучения электронами высокой энергии на характеристики ударных токов высоковольтных интегрированных 4H-SiC р-n-диодов Шоттки / А.А. Лебедев, В.В. Козловский, П.А. Иванов и др. // Физика и техника полупроводников. 2019, том 53, вып. 10. с. 1448-1452
2. Зубков В.И. Диагностика полупроводниковых наногетероструктур методами спектроскопии адмиттанса. Санкт-Петербург: Изд-во «Элмор», 2007. 220 с

ОСОБЕННОСТИ ЛОКАЛЬНОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ ЛАНТАНОБОРАТНЫХ И СУРЬМЯНО-СИЛИКАТНЫХ СТЕКОЛ С РАЗЛИЧНЫМ СОДЕРЖАНИЕМ КОМПОНЕНТ

¹Ермакова А.М., ¹Сухарина Г.Б., ²Алексеев Р.О., ³Тригуб А.Л.,
³Велигжанин А.А.³, Шахгильдян Г.Ю.², ¹Волошановская А.С., ¹Авакян Л.А.,
¹Бугаев Л.А., ²Сигаев В.Н.

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

²Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,
Москва, Россия

³Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт",
Москва, Россия

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

Оптическое материаловедение – значимый раздел материаловедения, представляющий большой интерес с точки зрения изучения свойств и методов получения материалов, в том числе различных видов стекол, применяемых в оптике. Боратные стекла системы $\text{La}_2\text{O}_3\text{-Nb}_2\text{O}_5\text{-B}_2\text{O}_3$ (LNB) и сурьмяно-силикатные стекла системы $\text{Sb}_2\text{O}_3\text{-Si}_2\text{O}_3$ (SS) являются важными объектами исследования, поскольку представляют собой перспективные материалы для широкого круга применений в промышленном производстве. Например, боратные стекла, необходимы для решения задач в оптическом приборостроении, электротехнике, биомедицине и других отраслях [1]. Целью работы является изучение структуры таких стекол, что позволит установить ее влияние на такие процессы, как стеклообразование, а также на оптические свойства материала.

В работе были рассмотрены 5 образцов стекол: образец системы SS, содержащий (25%) оксида сурьмы и (75%) оксида кремния и 4 образца стекол системы LNB с одинаковым содержанием оксида лантана (22.5%), различным содержанием оксида ниобия (от 5% до 30%) и оксида бора (от 72.5% до 47.5%). Образцы синтезированы химиками Московского университета РХТУ им. Менделеева.

Спектры рентгеновского поглощения L3-края лантана в образцах LNB и K-края сурьмы в SS были измерены в Курчатовском источнике синхротронного излучения на станции «Структурное материаловедение» [2]. С использованием методов многократного рассеяния и конечных разностей, реализованного в программном комплексе FDMNES [3] выполнено моделирование спектров XANES. В ходе исследования в изучаемых образцах стекол было установлено наиболее вероятное ближнее окружение атомов лантана и сурьмы. Выявлена тенденция изменения ближнего окружения атомов лантана в зависимости от изменения содержания концентрации компонент в составе образцов LNB.

Литература

1. Bengisu M. Borate glasses for scientific and industrial applications: a review //Journal of materials science. – 2016. – Т. 51. – №. 5. – С. 2199-2242.
2. Chernyshov A. A., Veligzhanin A. A., Zubavichus Y. V. Structural Materials Science endstation at the Kurchatov Synchrotron Radiation Source: Recent instrumentation upgrades and experimental results //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2009. – Т. 603. – №. 1-2. – С. 95-98.
3. Joly Y. X-ray absorption near-edge structure calculations beyond the muffin-tin approximation //Physical Review B. – 2001. – Т. 63. – №. 12. – С. 125120.

ПОЛУЧЕНИЕ ГЕТЕРОСТРУКТУР STO/SI И BFO-PFN/STO/SI

Жидель К.М.

*Южный федеральный университет, физический факультет, Ростов-на-Дону, Россия**E-mail: karinagidele@gmail.com*

В настоящее время как теоретически, так и экспериментально активно исследуются тонкие пленки и многослойные структуры, в которых реализуются физические эффекты, важные как для фундаментальных исследований, так и для широкого круга практических приложений. Тонкие пленки, многослойные структуры, материалы, в которых одновременно сосуществуют несколько типов упорядочения, играют важную роль в развитии нанотехнологий, создании современных устройств спинтроники, сенсорных устройств, энергонезависимой памяти и т.д.

Целью данной работы было получение и исследование тонкослойных гетероструктур SrTiO_3/Si (001) (STO/Si) и $0,5\text{BiFeO}_3-0,5\text{PbFe}_{0,5}\text{Nb}_{0,5}\text{O}_3/\text{SrTiO}_3/\text{Si}$ (001) (BFO-PFN/STO/Si) методом высоко частотного катодного распыления.

Структурное совершенство пленок, параметры элементарной ячейки в направлении, перпендикулярном плоскости подложки, а также ориентационные соотношения между пленкой и подложкой были установлены методом рентгеновской дифракции $\theta/2\theta$ методом на дифрактометре ДРОН-4-07 ($\text{CuK}\alpha$ -излучение).

Проведены спектральные исследования методом эллипсометрии для определения оптических параметров тонкопленочных структур. Измерения проводились на спектральном эллипсометре «ЭЛЛИПС-1991». ЭЛЛИПС-1991 основан на статической измерительной схеме. Установка позволяет проводить исследования в спектральном диапазоне 350–1000 нм. Спектральная зависимость эллипсометрических параметров ψ и Δ регистрировалась с шагом 2 нм при фиксированном угле падения света 65° . Встроенная программа «Spectroscan» использовалась для расчета показателя преломления n и коэффициента экстинкции k .

Таким образом, получены поликристаллические пленки с текстурой в направлении 001 ВЧ-катодным напылением в атмосфере кислорода керамических мишеней состава $0,5\text{BiFeO}_3-0,5\text{PbFe}_{0,5}\text{Nb}_{0,5}\text{O}_3$ на подложки монокристаллического кремния р-типа. Рентгенофазовые исследования подтвердили образование однофазных пленок. Параметры элементарной ячейки, рассчитанные для пленок в тетрагональном приближении, составили $c = 4,005 \pm 0,001 \text{ \AA}$; $a = 3,995 \pm 0,001 \text{ \AA}$. Посторонних фаз в виде простых оксидов, в том числе оксидов кремния, методом рентгеновской дифрактометрии в исследуемых образцах не обнаружено. Толщина слоев STO составила ~ 60 нм. Пленки STO демонстрируют ориентацию с хорошей кристаллизацией и могут использоваться в качестве буферных слоев для получения пленок BFO-PFN. Для описания дисперсионных зависимостей n и k использовалась модель STO на подложке Si с введенным переходным слоем на границах кремния и слоя STO – оксида кремния SiO_2 , тогда измеренные спектры максимально совпадали с расчетными. Пленки STO/ SiO_2 /Si имеют более высокий показатель преломления, чем материалы обычных планарных оптических волноводов, что выгодно для миниатюризации планарных устройств.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю д.ф.-м.н. Павленко А.В. за помощь при проведении настоящего исследования.

Использовано оборудование ЦКП «Объединенный центр научно-технологического оборудования ЮНЦ РАН (исследование, разработка, апробация)».

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Государственное задание в сфере научной деятельности научный проект № (0852-2020-0032)/(БА30110/20-3-07ИФ)).

НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ ИОННОЕ АССИСТИРОВАНИЕ КАК СПОСОБ
УПРАВЛЕНИЯ СТРУКТУРОЙ А-СН:АГ ПОКРЫТИЙ

Завидовский И.А., Стрелецкий О.А., Нищак О.Ю., Хайдаров А.А.

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

E-mail: ia.zavidovskii@physics.msu.ru

Структуры, представляющие собой серебряные наночастицы, инкапсулированные в матрицу гидрогенизированного аморфного углерода (а-СН:Аг), имеют потенциал применения в широком спектре практических приложений. Они могут использоваться, в частности, в качестве антибактериальных покрытий медицинских изделий, мембран топливных ячеек, стабильных подложек для поверхностно-усиленной спектроскопии комбинационного рассеяния, защитных покрытий. Свойства а-СН:Аг-структур существенным образом зависят от концентрации, размера и формы серебряных частиц. В работе [1] показано, что облучение ионами низких (до 1000 эВ) энергий в процессе осаждения – ионное ассистирование – позволяет управлять размером серебряных наночастиц. В рамках настоящей работы а-СН:Аг покрытия были изготовлены методом импульсно-плазменного распыления графитовой мишени в условиях облучения ионами аргона различных токов и энергий. Описание методики осаждения представлено в работе [2].

Покрyтия были исследованы методом просвечивающей электронной микроскопии (см. рис. 1). Можно видеть, что различные параметры ионного ассистирования приводят к разнообразным изменениям в форме наночастиц, таким, как двойникование и формирование огранки.

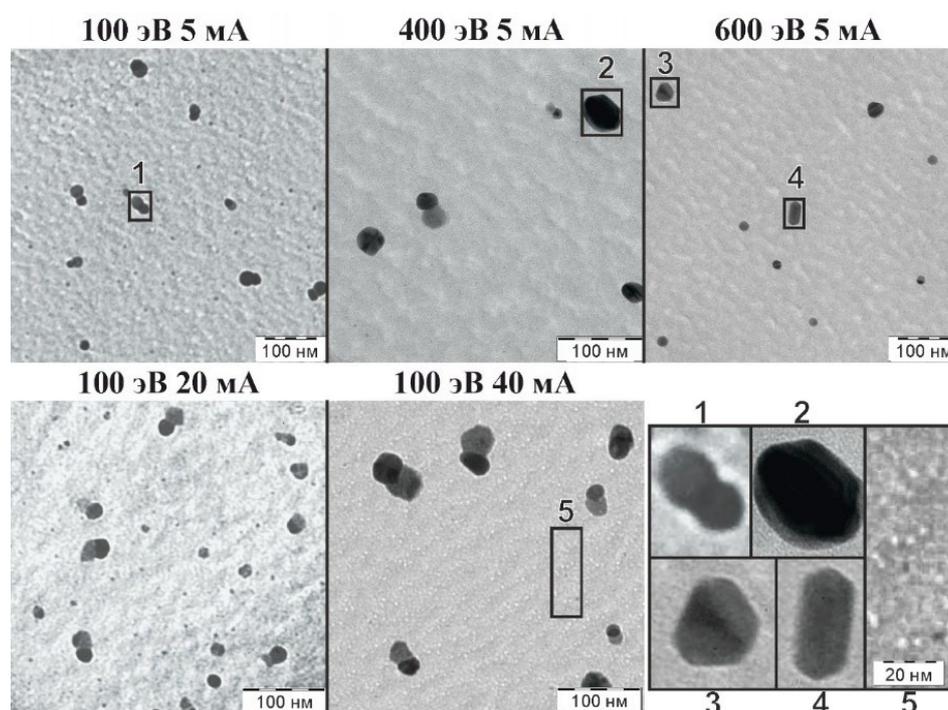


Рис. 1. Изображения а-СН:Аг-структур, изготовленных при различных энергиях и токах ионного ассистирования. На увеличенных фрагментах изображений показаны особенности структуры пленок

Ионное ассистирование инициирует ряд процессов, оказывающих влияние на размеры серебряных включений. В их число входит формирование дефектов, увеличение поверхностной подвижности атомов и зародышей; селективное распыление серебра. Установлено, что увеличение тока ионов в большей степени способствует ионно-

индуцированному усилению подвижности серебряных зародышей, приводящему к их коалесценции и возрастанию числа укрупненных включений. В свою очередь, увеличение энергии ионов в большей степени способствует дефектообразованию на поверхности растущей пленки. Дефекты, в свою очередь, играют роль предпочтительных центров зародышеобразования, вследствие чего их формирование приводит к росту числа мелких частиц.

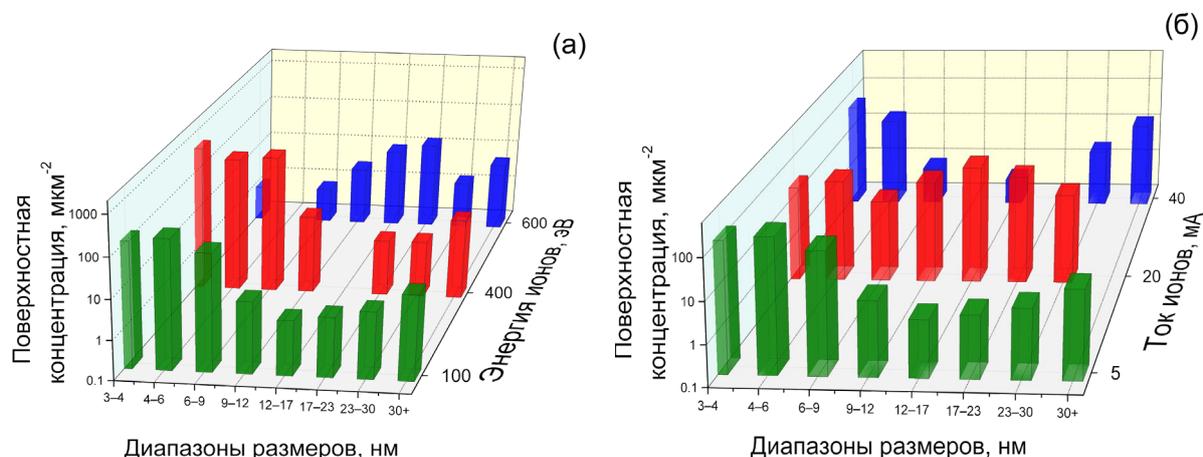


Рис. 2. Распределение по размерам серебряных наночастиц, инкапсулированных в матрицу аморфного углерода, полученных при различных энергиях (а) и токах (б) ассистирования.

Проведенный анализ позволил установить влияние эффектов, способствующих тому, что рост энергии и тока ассистирования приводит к разделению серебряных наночастиц на два характерных размера (3-5 нм и 20-30 нм), а также исследовать воздействие ассистирования на структуру углеродной матрицы.

Завидовский И.А. является стипендиатом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90077.

Литература

1. Streletskiy O.A., Zavidovskiy I.A., Nischak O.Yu., Haidarov A.A. Size control of silver nanoclusters during ion-assisted pulse-plasma deposition of carbon-silver composite thin films // *Vacuum*. 2020. V. 175, P. 109286. <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2020.109286>
2. Zavidovskiy I.A., Streletskiy O.A., Nishchak O.Yu., Haidarov A.A., Pavlikov A.V. The influence of ion assistance energy on structural and optical properties of carbon-silver nanocomposites // *Thin Solid Films*. 2021. V. 738, P. 138966. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2021.138966>

СТРУКТУРА, МАГНИТНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ ЯДРО@ДВОЙНАЯ ОБОЛОЧКА $\text{Fe}_7\text{C}_3/\text{Fe}_x\text{O}_y/\text{C}$

Заяханов В.А., Фунтов К.О.

*Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова ФНИЦ
«Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия
E-mail: zaiahanov@gmail.com*

Наночастицы ядро@оболочка (НЧ) вызывают большой интерес из-за потенциального применения в различных научных и технологических областях, включая катализ, синтез Фишера-Тропша, хранение данных, защита от коррозии, биомедицина. Для практических применений важно научиться управлять свойствами НЧ при их синтезе.

Обработка ферроцена при высоком давлении и температуре (НР-НТ обработка) позволяет хорошо контролировать состав НЧ [1]. В данной работе были получены НЧ $\text{Fe}_7\text{C}_3/\text{Fe}_x\text{O}_y/\text{C}$ при нагреве ферроцена до 900°C под давлением 8 ГПа в течение $t = 10\text{--}10000$ секунд. Магнитные, структурные и электронные свойства наноконпозитов изучены методом XRD, TEM, HAADF-STEM, ED, Мессбауэровской спектроскопией и магнитными измерениями. ПЭМ-изображения образца при $t = 1000$ с показано на рисунке 1. Установлено, что основными продуктами разложения ферроцена являются различные кристаллические фазы карбидов и оксидов железа, заключенные в матрицу из аморфного углерода.

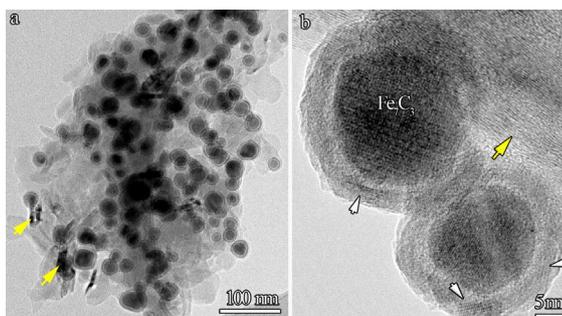


Рис. 1. ПЭМ-изображения: А) общее изображение $t = 1000$ образца $\text{Fe}_7\text{C}_3/\text{Fe}_x\text{O}_y/\text{C}$ (желтыми стрелками указаны частицы графитизированного углерода); Б) ВР-изображение 1000 с образца, демонстрирующее структуру ядро@оболочка

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 19-72-00095) в части анализа порошковых рентгенограмм, проведения мессбауэровских и рамановских экспериментов, обработке и анализу результатов, и Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части экспериментов по просвечивающей электронной микроскопии наноконпозитов.

Автор выражает благодарность за руководство и значительную помощь в работе к.ф.-м.н. Старчикову С.С. и проф. д.ф.-м.н. И.С. Любутину, Васильеву А.Л. за электронно-микроскопические исследования, к.ф.-м.н. Чумакову Н.К. за магнитометрию, а также проф. Давыдову В.А. и Агафонову В.Н за предоставленные образцы.

Литература

1. Starchikov S.S. et al. Core@shell nanocomposites $\text{Fe}_7\text{C}_3 / \text{Fe}_x\text{O}_y / \text{C}$ obtained by high pressure-high temperature treatment of ferrocene $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ // Carbon N. Y. 2021. Vol. 178. P. 708–717.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА ОБРАЗОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ГРАФИТА МЕТОДАМИ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ.

Иванов О.В.

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

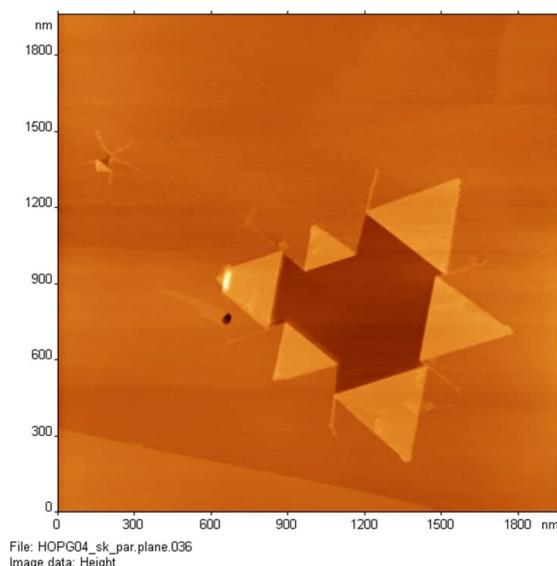
E-mail: ivanov.ov18@physics.msu.ru

Графит является одним из самых популярных материалов для исследования, поскольку он находит применение во множестве отраслей науки и техники. Благодаря своим инертным свойствам и хорошей проводимости, он используется в качестве атомно-гладких подложек для исследования молекул и плёнок, а так же потенциально имеет применение в нанoeлектронике и в качестве основы высокочувствительных сенсо-

ров[1,2]. Одним из высокоинформативных методов исследования графита является атомно-силовая микроскопия (АСМ) и туннельная сканирующая микроскопия (СТМ).

В данной работе был исследован эффект образования дефектов на поверхности графита при помощи атомно-силового микроскопа (АСМ). При подводе к поверхности игла касается поверхности, а затем резко отводится. В момент касания происходит захватывание верхних слоёв. Это происходит до тех пор, пока упругая энергия деформации слоёв не превысит энергию образования линии излома. Кантилевер имеет заданную жёсткость, что позволяет определить фактическую силу его воздействия на поверхность графита по отклонению светового пятна на фотодиоде.

Данные, полученные методом АСМ, позволяют определить периметр данного дефекта и количество слоёв[3]. Разрыв слоёв может происходить с появлением ступеней типа зигзаг и кресло, для образования которых требуется разная энергия. В данной работе произведён сравнительный анализ теоретически рассчитанной энергии образования дефекта с экспериментально полученными данными.



Литература

1. Chen Z., Lin Y.-M., Rooks M.J., Avouris P. Graphene nano-ribbon electronics // *Physica E.* – 2007. – Vol. 40. – P. 228-232.
2. Schedin F., Geim A.K., Morozov S.V. et al. Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene // *Nat. Mater.* – 2007. – Vol. 6. – P. 652-655.
3. Синецына О.В., Зондовая микроскопия углеродных материалов // Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва, 2009.

ИЗМЕРЕНИЯ ДИОДОВ С S-ОБРАЗНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКОЙ ВИРТУАЛЬНЫМ ПРИБОРОМ РХИ

Ивкин Л.И., Яковлев Г.Е., Зубков В.И.

*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» имени В.И. Ульянова (Ленина), факультет электроники, Санкт-Петербург, Россия*

E-mail: ivkin.leonid2000@gmail.com

Полупроводниковые приборы с S-образной вольт-амперной характеристикой (ВАХ) обладают уникальными свойствами, что позволяет использовать их при создании различных устройств [1]. Ввиду необычных оптических свойств S-диоды нашли применение в качестве фотоприемников для видимой и инфракрасной областей спек-

тра. Эти свойства диодов связаны с тем, что свет может изменять концентрацию и распределение носителей зарядов в базовой области диода. Используя зависимость частоты генерации от температуры S-диодов, можно создавать датчики температуры на их основе. Помимо датчиков S-диоды используются и в других устройствах, таких как генератор гармонических колебаний, релаксационный генератор, переключатель и др.

Для понимания работы прибора на основе S-диода необходимо знать параметры ВАХ этого диода, для чего был проведен ряд измерений, в том числе малосигнальных параметров кремниевого p-n-диода, легированного глубокой примесью золота. Измерения ВАХ проводились на специально созданном виртуальном инструментальном оборудовании на базе модульной платформы PXI (PCI eXtension for Instrumentation), предназначенной для создания многофункциональных измерительных систем. Для проведения измерений использовался модуль PXI-4072, представляющий собой цифровой мультиметр и модуль PXI-4110 – программируемый источник питания. К источнику постоянного тока подключался диод, параллельно к нему подключалась емкость, последовательно им подключалось сопротивление нагрузки. Напряжение на диоде снималось с помощью мультиметра, работающего в режиме вольтметра.

В ходе измерений были получены вольт-амперные характеристики при использовании сопротивления нагрузки и емкости различных номиналов. Пример результата измерений представлен на рисунке 1.

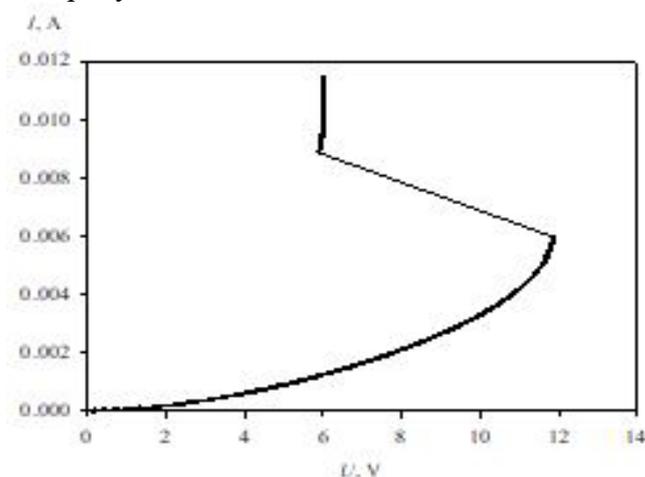


Рис.1. Вольт-амперная характеристика кремниевого p-n-диода.

Обнаруженный участок отрицательного дифференциального сопротивления связан с медленной перезарядкой глубокой примеси золота и может быть основой для построения резонансных датчиков температуры.

Литература

1. Викулин И.М., Стафеев В.И. Физика полупроводниковых приборов. – 2-е изд., перераб. и доп. - М.: Радио и связь, 1990. – 264 с.: ил.

ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГРАНУЛИРОВАННЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ $(\text{CO}_45\text{FE}_{45}\text{ZR}_{10})_x(\text{MGF}_2)_{100-x}$

Ивков С.А., Домашевская Э.П., Середин П.В., Голощапов Д.Л., Барков К.А.

ВГУ, физический факультет, Воронеж, Россия

E-mail: ivkov@phys.vsu.ru

Интерес научного сообщества в исследованиях эффекта туннельного магнитосопротивления и гигантского магнитосопротивления остается на высоком уровне на протяжении многих лет. В последние годы высокотехнологические компании анонсирова-

ли выпуск магниторезистивной оперативной памяти на основе данных эффектов. Однако до сих пор остается открытым вопрос о составах и механизмах, происходящих в нанокompозитах (НК), обладающих уникальными свойствами ГМС и ТМС [1,2].

В лаборатории физики твердого тела ВГТУ в процессе ионно-лучевого распыления в атмосфере аргона были получены в едином цикле НК металл-диэлектрик $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$ в широком диапазоне относительного содержания металлической составляющей к диэлектрику MgF_2 ($9 \leq x \leq 50$). Толщины получаемых таким образом слоев гранулированных НК варьировались в пределах (1 - 4) мкм.

В предыдущих работах [3,4] мы исследовали структурные свойства представленных нанокompозитов с помощью метода рентгеновской дифракции, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и др. В данной работе мы провели исследования электрофизических свойств нанокompозитов $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$.

Концентрационная зависимость электрического сопротивления (Рис.1а) показала изменение его величин в пределах от $R \approx 10^9 \text{ Ohm}$ при $x = 7$ ат. % до нескольких единиц Ohm при $x = 50$ ат. % сплава в НК. В переходном интервале от 25 до 34 ат. % наблюдается резкое уменьшение сопротивления при небольшом изменении относительного атомного состава НК, соответствующее порогу перколяции $x = 30$ ат. %

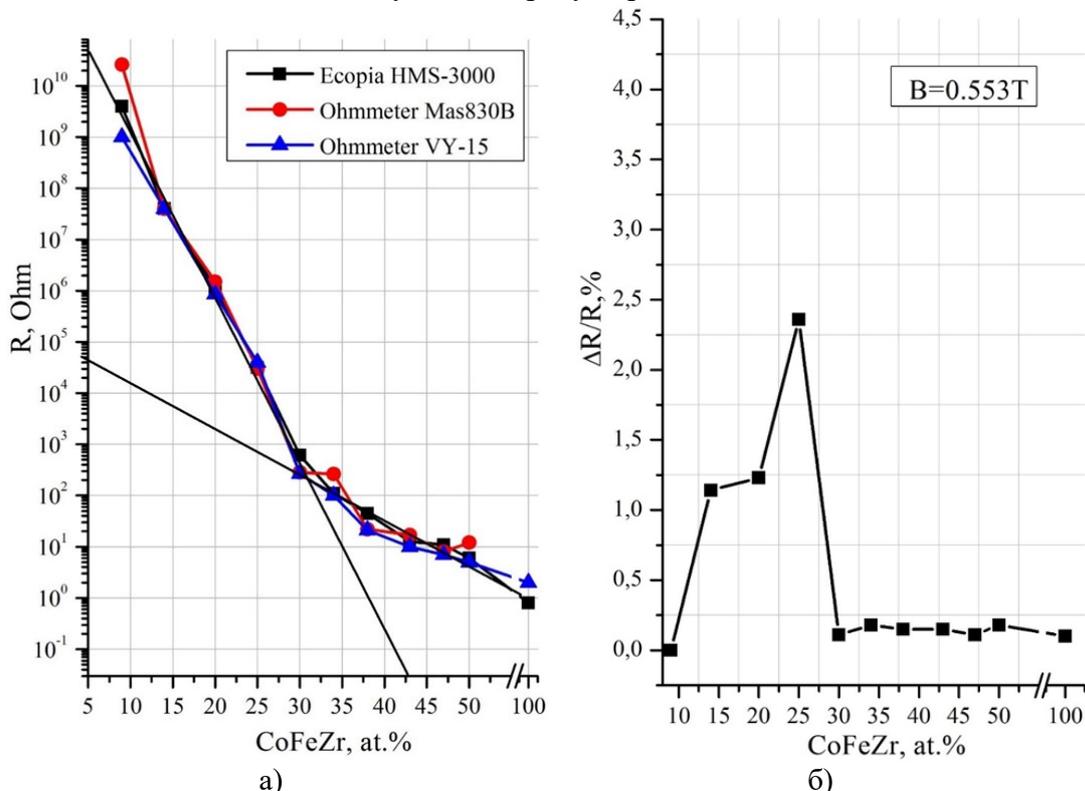


Рис.1 Концентрационная зависимость электрического сопротивления (а) и магниторезистивного эффекта (б) образцов системы $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$

Полученная концентрационная зависимость магниторезистивного эффекта (Рис.1б) полностью согласуется с общей моделью ТМС, в соответствии с которой число туннелирующих сквозь диэлектрический барьер электронов возрастает при уменьшении расстояния между соседними гранулами. Вблизи порога перколяции морфология НК такова, что слой диэлектрика между гранулами имеет минимальную толщину.

Данные по импедансометрии НК $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$ показывают две различные картины годографов для составов до и после порога перколяции (Рис.2). На годографе слева наблюдается полуокружность, которая соответствует типичному характеру поведения RC-цепи для металлических кластеров в диэлектрической матрице. После порога перколяции годограф импеданса имеет вид прямой вертикальной линии.

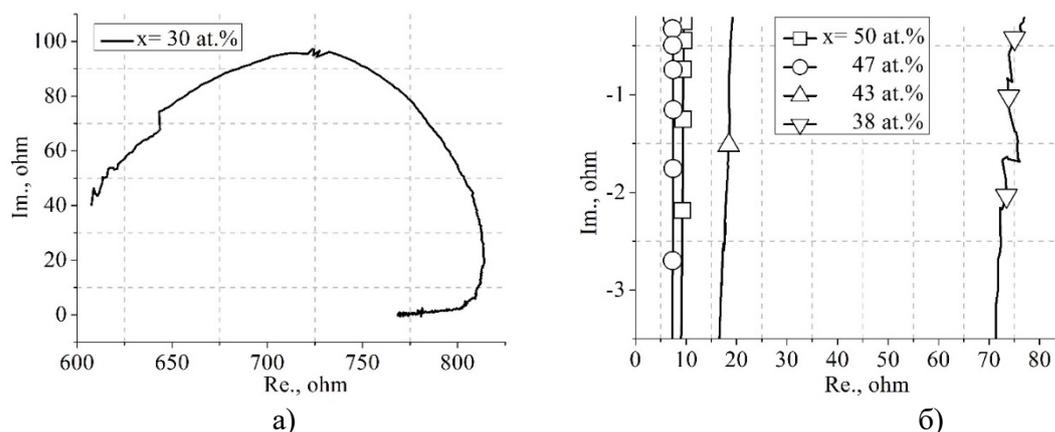


Рис. 2 Годографы импеданса для нанокompозитов $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$ с различным содержанием магнитного сплава: $x=30$ ат. % (а) и $x=50;47;43;38$ ат. % (б).

Значения сопротивления и емкости НК разного состава, определенные по данным импедансометрии (Табл.2), показывают, что емкость НК в доперколяционной области не превышает значений нескольких пикофарад и только в области порога перколяции ($x=30$ ат. %) увеличивается на три порядка до нескольких нанофарад. Такое увеличение емкости обусловлено формированием металлических нанокристаллов, распределенных в диэлектрической матрице.

Табл. 1 Концентрационная зависимость полного электрического сопротивления R и емкости C образцов системы $(\text{Co}_{45}\text{Fe}_{45}\text{Zr}_{10})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$

x , ат. %	20	25	30	34	38	43	47	50
R , Ohm	$13 \cdot 10^6$	$12 \cdot 10^4$	830	136	75	16	8	8
C , F	$6 \cdot 10^{-12}$	$6 \cdot 10^{-12}$	$4 \cdot 10^{-9}$	$12 \cdot 10^{-9}$	-	-	-	-

Литература

- [1] T.N. Koltunowicz, P. Zhukowski, V. Bondariev, A. Saad, et. al. / Enhancement of negative capacitance effect in $(\text{CoFeZr})_x(\text{CaF}_2)_{100-x}$ nanocomposite films deposited by ion beam sputtering in argon and oxygen atmosphere // J. Alloys and Compounds, V. 615, S1, 2014, P.361
- [2] J.A. Fedotova, A.V. Pashkevicha, T.N. Koltunowicz, et. al. / Negative capacitance of nanocomposites with CoFeZr nanoparticles embedded into silica matrix // J. MMM, V.511, 2020, P166963
- [3] E.P. Domashevskaya, S.A. Ivkov, A.V. Sitnikov, O.V. Stogney, et. al. / The features of CoFeZr alloy nanocrystals formation in film composites of $(\text{CoFeZr})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$ // J. Alloys and Compounds, 870 (2021) 159398
- [4] E.A. Ganshina, V.V. Garshin, S.A. Ivkov, E.P. Domashevskaya, et. al. / Effect of Phase Transformations of a Metal Component on the Magneto-Optical Properties of Thin-Films Nanocomposites $(\text{CoFeZr})_x(\text{MgF}_2)_{100-x}$ // Nanomaterials, 2021, V.11, P.1666

ОСОБЕННОСТИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ ПОВЕРХНОСТИ И ГРАНИЦ РАЗДЕЛА СТРУКТУР НАНОЧАСТИЦ МЕДИ ДЛЯ БИОСЕНСОРИКИ

Какулия Ю.С., Паринова Е.В.

Воронежский государственный университет, физический факультет,
Воронеж, Россия
E-mail: kakuliia@phys.vsu.ru

Наночастицы меди, выращенные в пористой матрице диоксида кремния, являются перспективными структурами для использования в сенсорах, основанных на эффекте

поверхностно-усиленного комбинационного рассеяния света. Данное явление позволяет проводить диагностику химических и биологических молекул в таких областях как биомедицина и экология. При этом, для эффективного использования таких структур в сенсорах, необходимо понимание физико-химических и структурных свойств, в том числе с точки зрения развитой поверхности и границ раздела. Поэтому необходимо детальное изучение морфологии, состава, структуры наряду с атомным и электронным строением материалов, образующихся при формировании наночастиц меди в матрицах пористого SiO_2 на Si.

Образцы были сформированы на кремниевой подложке с пористым слоем диоксида кремния, в котором находились медные наноструктуры. Их синтез производили химическим жидкофазным ростом из неорганических солей меди с использованием набора режимов, позволяющих варьировать степень заполнения пор SiO_2 . Поры в слое SiO_2 формировали облучением структур быстрыми тяжелыми ионами (SHI: Swift Heavy Ions, K γ 1.75 МэВ, флюэнс $10^6 - 10^8 \text{ см}^{-2}$) с последующим жидкофазным химическим травлением, используя разбавленные водные растворы плавиковой кислоты (1-5% HF). Диаметр пор оксидной матрицы составлял от 500 нм. Таким образом, было получено две серии образцов с различной степенью заполнения пор наночастицами, отличающихся средним размерами. В обоих случаях степень заполнения пор была: неполное покрытие дна поры, частичное заполнение поры, полное заполнение поры, переполнение объема поры с образованием глобул. Также были изучены образцы с планарным покрытием наночастицами меди, и с глобулами образованными на планарном покрытии.

Рентгеновскую дифракцию проводили на приборе ARL X'TRA в геометрии Брэгга-Брентанно. Съемку производили в режиме Θ - Θ , образцы помещали на кремниевые подложки с «нулевым фоном». В качестве источника использовали рентгеновскую трубку с медным анодом. Средний размер областей когерентного рассеяния (предположительно нанокристаллитов) определялась по методу Дебая-Шеррера. Атомное и электронное строение было исследовано синхротронным методом спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (XANES - X-ray absorption near edge structure) на канале вывода синхротронного излучения UE52_PGM CoESCA накопительного кольца BESSY II Гельмгольц Центра Берлин. Морфология поверхности изучалась методом растровой электронной микроскопии (SEM – Scanning Electron Microscopy) с помощью сканирующего электронного микроскопа Carl Zeiss ULTRA 55 в Институте фотонных технологий в городе Йена, Германия. Также проводилась статистическая оценка размеров частиц формирующих структуру в программном пакете ImageJ.

Согласно данным растровой электронной микроскопии средний (преимущественный) размер наночастиц в первой группе от ~30 нм до ~65 нм соответственно заполнению пор, а во второй от ~50 до ~100 нм, соответственно заполнению пор.

Анализ Cu $L_{2,3}$ -спектров XANES для описанных выше образцов позволил отметить, что для всех сформированных структур наблюдается изменение степени окисления, вплоть до формирования оксида, близкого к естественному, для случая второй серии образцов и полного заполнения поры или переполнения объема поры. В образцах первой серии с неполным покрытием дна поры, частичным заполнением поры, полным заполнением поры, а также в образцах второй серии с неполным покрытием и частичным заполнением поры наблюдается преобладание оксида меди (I) – Cu_2O , а для остальных образцов наблюдается два оксида: Cu_2O и CuO . Это можно объяснить различием в размерах кристаллов двух серий образцов, на поверхности которых происходит взаимодействие с кислородом.

По результатам исследований рентгеновской дифракции были получены области когерентного рассеяния (размеры кристаллитов). В силу малой интенсивности сигнала от медных наночастиц, зарегистрировать рентгенодифракционные данные удалось только для тех образцов, в которых меди было больше количественно. Но даже для тех

структур, от которых удалось получить адекватную картину дифракции рентгеновских лучей, для размеров кристаллитов показано хорошее соответствие с результатом статистической обработки электронно-микроскопических данных.

В совокупности полученные результаты позволяют говорить о том, что используемый подход в формировании структур с наночастицами меди позволяет получать вариацию физико-химического состояния поверхности и границ раздела, что дает возможность плавно, через состав и структуру управлять сенсорными свойствами таких объектов, основанными на проявлении поверхностно-усиленного (гигантского) комбинационного рассеяния света.

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

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА НАНОКОМПОЗИТНЫХ ПЛЕНОК W_xSi_{1-x}

Керсновский Е.С.¹, Хыдырова С.² Михайлова И.В.², Васильев Д.Д.²,
Моисеев К.М.², Барков К.А.¹, Ивков С.А.¹, Буйлов Н.С.¹

¹*Воронежский государственный университет, физический факультет,
Воронеж, Россия*

²*МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия
kersnovskiy@inbox.ru*

Ультратонкие сверхпроводящие пленки W_xSi_{1-x} являются перспективным материалом для использования в однофотонных детекторах –сверхпроводниковых детекторах видимого и ИК диапазонов волн (Superconducting Single Photon Detector – SSPD). Использование данного материала, в теории превышающий ряд параметров (плотность критического тока, коэффициент поглощения в ИК области) используемого в данное время NbN, позволит значительно повысить квантовую эффективность системы приема одиночных фотонов. Однако технологические процессы получения сплавов W-Si, а также покрытий на их основе часто являются сильно неравновесными, такие как магнетронное напыление, из-за чего в этой системе могут формироваться различные соединения сильно отличающиеся по физико-химическим свойствам [1].

В рамках данной работы были исследованы пленки W-Si, получены в МГТУ имени Н.Э. Баумана магнетронным распылением вольфрама и кремния на подложки кремния и сапфира. Толщина пленок составляла 12 нм. Исследование структуры пленок W-Si проводилось с помощью рентгеновской дифрактометрии на дифрактометре PANalytical Empyrean V.V. с монохроматизированным $Cu\ \alpha_1$ излучением, в ЦКПНО ВГУ. Кроме того, для одновременного контроля как кристаллических, так и аморфных фаз на основе кремния, пленки анализировались с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света на спектрометре Raman Microscope RamMics M532 EnSpectr в области $360-560\ \text{см}^{-1}$ с использованием лазера с длиной волны 532 нм, а также с помощью уникального метода ультрамягкой рентгеновской эмиссионной спектроскопии (УМРЭС) на спектрометре РСМ-500 [2]. Для более точного определения фазового состава исследуемого образца по данным УМРЭС согласно методике, описанной в работе [3], проводится компьютерное моделирование экспериментальных рентгеновских эмиссионных Si L_{2,3} спектров на основе эталонных спектров.

Результаты исследований показывают, что при совместном магнетронном распылении W и Si на кремниевую подложку наблюдается только стабильные фазы силицидов вольфрама WSi_2 и W_5Si_3 . В то же время, в составе пленок, полученных на сапфировых подложках, преобладает метастабильная фаза W_3Si_2 . Такой результат может свидетель-

ствовать о взаимодействии растущей пленки с кремниевой подложкой и обогащением силицидной пленки кремнием с последующим формированием высших силицидов.

Литература

1. МГТУ им. Н.Э. Баумана Лаборатория «Элионные процессы и нанотехнологии» Кафедра «Электронные технологии в машиностроении» 2019 г.
2. И. В. Федин, Е. В. Ерофеев, В. В. Федина AlGaIn/GaN диоды с барьерами Шоттки на основе Ta, Ni, WSi и TiN/ журнал Проблемы научной мысли Т. 11 №1 2017 г. с. 122-127
3. Мустафаев Г.А., Черкесова Н.В., Хасанов А.И., Мустафаев А.Г. Применение силицида вольфрама как токопроводящего материала для металлизации/ Журнал «Известия Чеченского Государственного Университета» №4 (8) 2017г. С. 35-40

СИНТЕЗ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ ДЛЯ ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ В ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТАХ.

Кессель Д.Э.¹, Шibaев А.В.¹, Швец П.В.², Камышинский Р.А.^{3,4}, Орехов А.С.^{3,4}, Абрамчук С.С.¹, Хохлов А.Р.⁵, Филиппова О.Е.¹

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

² Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта,

³ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,

⁴ Московский физико-технический институт,

⁵ Institute of Advanced Energy Related Nanomaterials, Ulm University

E-mail: dkshmr@yandex.ru

В последние годы большое внимание уделяется синтезу и исследованию магнитных наночастиц. Их можно использовать во многих различных приложениях, таких как адресная доставка лекарств, гипертермия для лечения рака, магнитно-резонансная томография (МРТ) и изготовление полимерных материалов, имеющих магнитные свойства. Во многих из этих приложений наночастицы анизотропной, в частности цилиндрической, формы имеют большое преимущество перед сферическими частицами того же объема, поскольку они имеют более высокую намагниченность и могут использоваться для придания материалам анизотропных свойств. Особый интерес представляют наночастицы оксидов железа и феррита кобальта, поскольку они дешевы и обладают высокой намагниченностью насыщения. Целью данной работы является синтез цилиндрических магнитных наночастиц оксида железа (Fe_3O_4) и феррита кобальта (CoFe_2O_4) и исследование их структуры и свойств.

Цилиндрические наночастицы оксида железа и феррита кобальта были получены методом обратного соосаждения с использованием постоянного магнитного поля в качестве «шаблона» для анизотропного роста. Были получены изображения синтезированных наночастиц с ПЭМ высокого разрешения, которые показывают, что они являются монокристаллическими и не имеют преимущественной ориентации осей кристаллов вдоль направления стержня. Был предложен механизм образования наночастиц цилиндрической формы в магнитном поле [1], который протекает в два этапа: 1) образование малых (размером несколько нм) сферических наночастиц на начальной стадии реакции, 2) их ориентация и сборка в магнитном поле и сплавление в стержни. Было показано, что наночастицы феррита кобальта обладают лучшими магнитными свойствами, чем частицы оксида железа с такой же морфологией.

Цилиндрические наночастицы, полученные с помощью магнитного поля, могут быть использованы для создания полимерных композитов или гелей, которыми можно манипулировать с помощью магнитного поля [2].

Литература

1. Shibaev A.V., Shvets P.V., Kessel D.E., Kamyshinsky R.A., Orekhov A.S., Abramchuk S.S., Khokhlov, A.R., Philippova O.E. Beilstein J. Nanotechnol., 2020, V.11, P.1230-1241.
2. Shibaev A.V., Smirnova M.E., Kessel D.E., Bedin S.A., Razumovskaya I.V., Philippova O.E. Nanomaterials, 2021, V.11, P.1721

ИССЛЕДОВАНИЕ УДАРНОЙ ВЯЗКОСТИ МНОГОСЛОЙНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ, АРМИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

Кобзев В.А., Чеченин Н.Г., Авторин С.

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

E-mail: kobzzzev@mail.ru

Одной из актуальных задач материаловедения является создание материалов, устойчивых к воздействию скоростных частиц. В настоящее время наиболее перспективными конструкционными материалами являются полимерные, армированные углеродными нанотрубками. Выраженная анизотропия свойств УНТ позволяет конструировать композиционные материалы с уникальными свойствами, актуальными для космических применений.

Наноккомпозиты – новый тип материалов, отличающийся от обычных композиционных материалов размером упрочняющей фазы. Одними из самых перспективных наполнителей для изготовления наноккомпозитов являются углеродные нанотрубки. В работе изучено изменение свойств композитных материалов при введении УНТ в матрицу полимера. Представлены результаты исследования ударной стойкости различных многослойных полимер наноккомпозитов с различной концентрацией углеродных нанотрубок на ударных установках.

В работе помимо основной задачи показана компьютерная модель, воссоздающая эксперимент и проведена верификация модели по экспериментальным данным.

Литература

1. Макунин А.В., Чеченин Н.Г. Полимер-наноуглеродные композиты для космических технологий. «Университетская книга» 2011 г.
2. Раков Э.Г. Материалы из углеродных нанотрубок. «Лес», Russ. Chem. Rev. 82(6), 538-566, (2013).
3. Воробьева Е.А., Бачурин К.Е., Макунин А.В., Чеченин Н.Г. Синтез и исследование наноккомпозитов с включением углеродных нанотрубок в сборнике. Труды XII Межвузовской научной школы молодых специалистов «Концентрированные потоки энергии в космической технике, электронике, экологии и медицине», Москва 21-22 ноября 2011. НИИЯФ МГУ Москва.
4. J. Njuguna, K. Pielichowski and J. R. Alcock. Epoxy-Based Fibre Reinforced Nanocomposites: Current Status. Advanced engineering materials, volume 9, issue 10, pages 835-847, October 2007.
5. N.G. Chechenin, P.N. Chernykh, E. A. Vorobyeva, O.S. Timofeev Synthesis and electroconductivity of epoxy/aligned CNTs composites, Appl. Surf. Sci. (2013).
6. Laurent Maheo, Frédéric Dau, Damien Andre, Jean-Luc Charles, Ivan Iordanoff. A promising way to model cracks in composite using Discrete Element Method. Composites Part B: Engineering, Elsevier, 2015.

ОСОБЕННОСТИ СОЗДАНИЯ МЕДНОЙ КОНТАКТНОЙ СЕТКИ НА ГЕТЕРОСТРУКТУРНОМ ФЭП

Кочергин А.В.¹, Аболмасов С.Н.², Теруков Е.И.^{1,2}, Шелопин Г.Г.²

¹Санкт-Петербургский Государственный Электротехнический Университет ЛЭТИ имени В.И. Ульянова (Ленина), факультет электроники, Санкт-Петербург, Россия

²Общество с ограниченной ответственностью «НТЦ тонкопленочных технологий в энергетике», Санкт-Петербург, Россия
E-mail: tem47@mail.ru

Солнечные элементы на основе кристаллического кремния (с-Si) занимают около 95% всего рынка фотоэлектрических систем для наземного применения [1]. Для сбора носителей заряда применяются контактные сетки, создаваемые на поверхности фотоэлектрических преобразователей (ФЭП) методом трафаретной печати серебрясодержащих паст. Результаты последних исследований показывают, что дальнейшее увеличение производства с-Si ФЭП до тераваттного (ТВт) уровня в будущем может привести к нехватке серебра и резкому росту его стоимости, что поставит под угрозу дальнейшее развитие наземной солнечной энергетики. Наиболее подходящей альтернативой серебру является медь (Cu), он почти на два порядка дешевле Ag и его запасы более чем достаточны для ТВт-производства с-Si ФЭП [2]. Одной из существующих технологий, позволяющей создать контактную сетку на поверхности ФЭП, является использование диэлектрической маски с последующим электрохимическим осаждением.

В данной работе исследовались особенности формирования защитных диэлектрических масок на основе тугоплавкие чернила (hot melt ink (HMI)). Для формирования защитных диэлектрических HMI масок использовался струйный принтер PiXDRO LP50 (SUSS Microtec).

Результаты изучения геометрии контактных дорожек показали, что ширина Cu контактной дорожки у ее основания изначально была равна $h_1 = 36 \pm 5$ мкм и увеличивалась по мере ее роста до величины более $h_4 = 50$ мкм при высоте контактной дорожки $w > 20$ мкм, рис.1. Как показали результаты тестов, адгезия медных гальванических контактных дорожек к поверхности ячейки составила порядка 3–5 Н/мм, что существенно превосходит адгезию низкотемпературных паст к ITO (1.5–2 Н/мм).

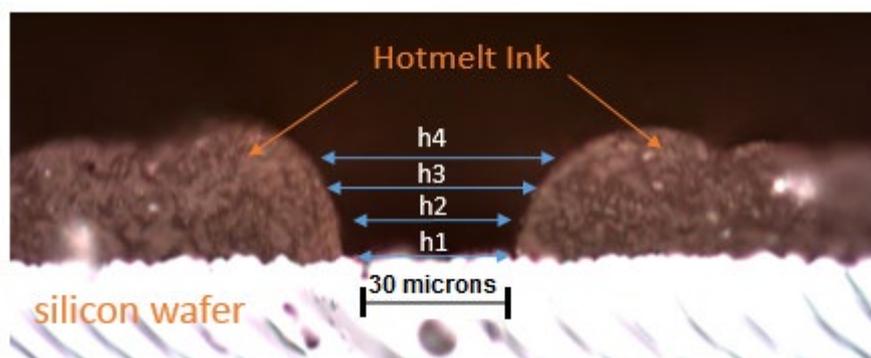


Рис. 1. Снимок поперечного сечения верхней стороны SHJ ФЭП после процесса нанесения защитной HMI маски струйным принтером.

В данной работе показано, что струйная печать на основе органических чернил в комбинации с электрохимическим осаждением является перспективным методом для создания узких (<40 мкм) медных контактных сеток на поверхности гетероструктурных ФЭП. Исследована зависимость эффекта увеличения разрешающей способности (dpi) струйного принтера в направлении на форму канавки. Проведено измерение адгезии медных гальванических контактных дорожек на поверхности ячейки.

Литература

1. Preu R., Lohmuller E., Lohmuller S., Saint-Cast P., Greulich J.M. // Passivated emitter and rear cell – Devices, technology and modelling, Applied Physics Reviews 7, 041315 (2020).
2. Verlinden P.J. // Future challenges for photovoltaic manufacturing at the terawatt level, Journal of Renewable Sustainable Energy 12, 053505 (2020); Hallam B., et al. // Challenges and opportunities for sustainable PV manufacturing at the Terawatt level, PV Cell Tech Conference, 2021.

ТЕРМОХИМИЧЕСКАЯ ПЕРЕРАБОТКА ПОЛИЭТИЛЕНА В СВЕРХКРИТИЧЕСКОМ ДИОКСИДЕ УГЛЕРОДА

Кравченко Е.И.

МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия
E-mail: kravchenko.ei18@physics.msu.ru

Мировое производство пластмасс превышает 350 миллионов тонн в год, и эта цифра постоянно растет [1]. Это делает проблему утилизации пластика приоритетной для человечества. Пластиковые отходы могут быть захоронены, переработаны механически, химически или сожжены для производства тепла. Идея химической переработки заключается в использовании пластиковых отходов в качестве сырья для производства химикатов с добавленной стоимостью. Учитывая очевидные недостатки свалки и сжигания, а также ограниченные возможности вторичной переработки большинства пластмасс, трудно представить решение проблемы пластиковых отходов без разработки новых стратегий химической переработки.

Целью нашей работы является исследование процесса термохимической декомпозиции полиэтилена в сверхкритическом диоксиде углерода в избытке кислорода. Эти исследования направлены на развитие научных основ новой технологии химической переработки пластиков, которой на данный момент из-за недостаточного количества эффективных методов подвергается только 1% пластиковых отходов [2]. При этом предлагается использовать экологически безопасную среду – сверхкритический (ск) диоксид углерода для процессов полимерной декомпозиции.

Химическая декомпозиция полиолефинов (полиэтилен и полипропилен) является нетривиальной задачей. Тем не менее существует несколько разработанных методов. Большинство научных исследований по вопросу использования сверхкритической (ск) среды для разложения данных полимеров сосредоточено на изучении ск-воды как абсолютно безвредного для окружающей среды растворителя [3]. Также изучено использование среды ск-спиртов [4] и ск-ацетона [5]. Сверхкритический диоксид углерода также может использоваться для рециркуляции или переработки полиолефинов, однако, ранее, насколько нам известно, эта среда для полиолефинов исследовалась только в приложении к процессам экстракции [6].

Преимущество использования сверхкритического диоксида углерода состоит в том, что это негорючее, малотоксичное вещество, проявляющее относительную инертность в химических реакциях. Переход диоксида углерода в сверхкритическое состояние происходит при относительно низком давлении (7.38 МПа) и температуре (31.1°C), что легко воспроизводимо в лабораторных условиях, а также поддается масштабированию при внедрении технологий в промышленность.

Ранее в нашей лаборатории успешно исследовали использование ск CO₂ для разложения полипропилена [7]. В настоящем докладе представлено исследование разложения полиэтилена. Изучена декомпозиция образцов ПЭ в различных массовых отношениях с кислородом в реакторе (исследованы отношения O₂:ПЭ=3:1, 1:1, 1.5:1) в присутствии CO₂ и без него, а также изучены различные времена декомпозиции. Все продукты реакций подверглись дальнейшему исследованию. Для олигомерной фракции про-

дуктов сравнивали данные о молекулярных массах, полученные с помощью диффузионно-упорядоченного ЯМР и гель-проникающей хроматографии. Термогравиметрический анализ показал, что содержание кислорода сильно влияет на выход летучих продуктов. Летучие продукты дополнительно анализировали с помощью ^1H , ^{13}C ЯМР, газовой хроматографии, масс-спектрометрии и потенциометрического титрования. Все полученные результаты свидетельствуют о том, что влияние sc-CO_2 более выражено при более низком массовом соотношении кислорода и полимера, что может быть полезно для проведения химической рециркуляции полиэтилена посредством термического окисления при минимизации необходимого количества кислорода.

В дальнейшем планируется провести дополнительные исследования для подбора максимально подходящих для декомпозиции условий и более подробного изучения продуктов реакции.

Литература

1. V. Beghetto, R. Sole, C. Buranello, M. Al-Abkal, M. Facchin, Recent Advancements in Plastic Packaging Recycling: A Mini-Review, *Materials* (Basel). 14 4782, 2021
2. Z.O.G. Schyns, M.P. Shaver, Mechanical Recycling of Packaging Plastics: A Review, *Macromol. Rapid Commun.* 421–27, 2021
3. A. Queiroz, G.B. Pedroso, S.N. Kuriyama, A.A. Fidalgo-Neto. *Curr. Opin. Green Sustain. Chem.*, 25, (2020)
4. L. Meng, D. Fan, Y. Huang, Z. Jiang, C. Zhang. *Appl. Surf. Sci.*, 261, 415, 2012
5. C.S. Nunes, P.R. Souza, A.R. Freitas, M.J.V. da Silva, F.A. Rosa, E.C. Muniz. *Catalysts*, 7, 1 2017
6. S. Ügdüler, K.M. Van Geem, M. Roosen, E.I.P. Delbeke, S. De Meester. *Waste Manag.*, 104, 148, 2020
7. I.V. Elmanovich, A.I. Stakhanov, V.V. Zefirov, A.A. Pavlov, B.V. Lokshin, M.O. Gallyamov. *J. Supercrit. Fluids*, 158, 104744, 2020

ФОРМИРОВАНИЕ ОДНОМЕРНЫХ АТОМНЫХ СТРУКТУР СЕРЕБРА НА ПОВЕРХНОСТИ ПЛАТИНЫ

Кудряшов С.А.

МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия
E-mail: kudriashov.sa18@physics.msu.ru

Фундаментальные исследования металлических систем при наличии примесей очень важны, так как понимание закономерностей и свойств таких систем может привести к созданию новых технологий производства интегральных микросхем или новых сплавов.

В представляемой работе исследовалось поведение атомов серебра на поверхности платины. Как было показано экспериментально, атомы серебра образуют цепочки при напылении на поверхность платины (997) [1]. При помощи кинетического метода Монте-Карло [2] было проведено моделирование поведения системы и исследовано влияние изменения температуры образца на формирование одномерных наноструктур на нем [3]. Показано, что ниже некоторой температуры происходит только диффузия одиночных атомов, которые в дальнейшем присоединяются к структурам, и система замораживается, не достигнув равновесного распределения. Эта температура для системы Ag на поверхности Pt оказывается равной приблизительно 110 К. Также с уменьшением температуры значительно увеличивается время, за которое система достигает термодинамического равновесия. Таким образом, исследование эволюции одномерных атомных структур в процессе охлаждения кинетическим методом Монте-Карло показало, что достижение системой термодинамического равновесия зависит от скорости охлаждения

и от времени проведения эксперимента, что необходимо учитывать при анализе экспериментальных данных и построении теоретических моделей.

Литература

1. P. Gambardella, H. Brune, K. Kern, and V.I. Marchenko. Equilibrium island-size distribution in one dimension // *Phys. Rev. B* 73, 245425 (2006).
2. M. Andersen, C. Panosetti, K. Reuter. A Practical Guide to Surface Kinetic Monte Carlo Simulations // *Frontiers in Chemistry* 7, Art. 202 (2019).
3. А. Г. Сыромятников, С. А. Кудряшов, А. М. Салецкий, А. Л. Клавсюк. Влияние процесса нагрева и охлаждения на длины одномерных атомных структур // *ЖЭТФ* 160, 410–414 (2021).

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МОРФОЛОГИИ ПОВЕРХНОСТИ ПЛАСТИН АЛМАЗА И ОКСИДА ГАЛЛИЯ В РЕЗУЛЬТАТЕ ПОСТРОСТОВОЙ ОБРАБОТКИ

Курасова К., Соломникова А.В.

*Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» имени В.И. Ленина, факультет электроники, Санкт-Петербург,
Россия*

E-mail: chayoon@yandex.ru

Ультраширокозонные полупроводники (УШЗП) обладают неоспоримыми потенциальными преимуществами при изготовлении приборов мощной и высокочастотной электроники, а также УФ-оптоэлектроники и при работе в экстремальных условиях. В данной работе были исследованы морфология поверхности двух различных УШЗП (алмаз и β -оксид галлия) с целью оценки качества поверхности и подбора оптимального метода обработки. Алмаз трудно поддается обработке ввиду высокой твердости (10 по шкале Мооса). Оксид галлия является достаточно хрупким материалом и, так же как и алмаз, требует подбора оптимального метода обработки и его параметров.

Алмазные пластины были вырезаны из монокристалла, выращенного методом высокого давления и высокой температуры (НРНТ) [1]. Кристалл оксида галлия был выращен методом Чохральского и далее расколот на образцы [2]. Морфология поверхности образцов исследовалась на автоматизированном сканирующем зондовом микроскопе SolverNEXT. В основе работы АСМ лежит силовое взаимодействие между зондом и поверхностью, регистрируемое зондами [3]. Для получения АСМ-изображений высокого качества были подобраны оптимальные параметры: амплитуда колебаний кантилевера – 3.1 нм, коэффициент усиления обратной связи – 0.5, количество точек в строке – 300. Сканирование проводилось с варьированием площади сканирования: от 100x100 мкм² до 3x3 мкм². В результате математической обработки полученных сканов были определены размах высот и средняя квадратичная шероховатость (RMS).

До обработки поверхности пластин значение RMS составляло от 3 до 15 нм для различных пластин алмаза и 5–20 нм для образцов оксида галлия. Затем образцы были подвергнуты механической обработке: шлифовке и полировке. Это позволило избавиться от крупных загрязнений на поверхности алмазных пластин и значительно снизить шероховатость поверхности образца оксида галлия: значение RMS составило 0.8 нм. Далее два алмазных образца были обработаны ионно-лучевым травлением в течение 30 минут, в результате чего RMS снизилось до 2–6 нм. Образец Ga₂O₃ не подвергался дальнейшей обработке ввиду хрупкости данного материала и большой величины встроенных напряжений: пластина начинала крошиться и расслаиваться.

Показано, что механическая обработка не является эффективным методом для алмаза и подходит исключительно для первоначальной его обработки, однако позволяет уменьшить значение RMS поверхности пластин оксида галлия. Ионно-лучевое травле-

ние в течение тридцати минут позволяет значительно снизить значения средней квадратичной шероховатости алмазных образцов и добиться достаточно высокого качества поверхности. Оксид галлия требует более мягкой обработки для получения пластин, пригодных для создания приборов оптоэлектроники.

Литература

1. Analysis of doping anisotropy in multisectorial boron-doped HPHT diamonds / V. Zubkov, A. Solomnikova, A. Koliadin, J.E. Butler // Mater. Today Commun. 2020. № 24. P. 100995.
2. Элементное и структурное картирование объемных кристаллов $(Al_xGa_{1-x})_2O_3$, полученных методом Чохральского / Д.А. Бауман [и др.] // Письма в ЖТФ. 2021. № 5. С. 19-22.
3. Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии: учеб. пособие. Нижний Новгород: Российская академия наук, Институт физики микроструктур, 2004.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОВОДИМОСТИ ЗОЛОТО-УГЛЕРОДНЫХ НАНОПЛЕНОК

Лелекова А.Ф., Халимов Н.А., Эйум Э.С.П.

*Владимирский государственный университет им. А.Г. и Н.Г. Столетовых,
кафедра физики и прикладной математики, Владимир, Россия
E-mail: lelekowa.a@yandex.ru*

Исследование проводимости гибридных пленок Au-C является перспективной задачей, которая позволяет в дальнейшем развивать нанотехнологический подход, заключающийся в лазерной активации электронов композитных материалов, что приведет к значительному прорыву в применении плазмонных метаматериалов в микро- и наноэлектронике.

Для получения гибридных нанопленок на подложку полированного алюминия, напылялся коллоидный раствор на водной основе в составе наночастиц золота и углерода sp-гибридизации. Метод получения коллоидного раствора описан в работе [1] в деталях. Для осаждения из жидкой фазы использовался импульсный режим работы компрессора, который под давлением распылял в область над подложкой-коллектором порцию раствора. Распределение сухого остатка на подложке образует отдельно расположенные кластеры, содержащие комплексы линейно-цепочечного углерода и наночастиц Au. При оптическом увеличении кластерные островки, размерами в несколько мкм, объединены с соседними протянутыми тонкими углеродными нитями, участвующими в переносе зарядов, т.е. электронной проводимости.

Для оценки проводящих свойств и рельефа поверхности тонкой гибридной пленки использовался прибор Ntegra Aura производства NT-MDT. Получение информации об электрофизических свойствах осуществлялось с помощью модуля СТМ (сканирующий туннельный микроскоп). Для изучения фотоактивации электронов схема СТМ была модернизирована. Сфокусированный лазерный луч на длине волны плазмонного возбуждения наночастиц золота был нанесен на поверхность гибридной пленки Au-C во время непрерывной работы СТМ (рис. 1).

Используя обновленную схему были получены вольтамперные характеристики, исследуемых гибридных пленок были получены после нанесения 12 и 24 импульсов компрессора. Сравнение экспериментальных данных показало, что увеличение мощности лазерного излучения приводит к увеличению туннельного тока, проводимости и уменьшению сопротивления (рис. 2). Нанопленка большей толщины всегда обладает большей проводимостью благодаря дополнительным каналам распространения электронов, но для пленки меньшей толщины также наблюдается тенденция к снижению сопротивления с увеличением мощности излучения.

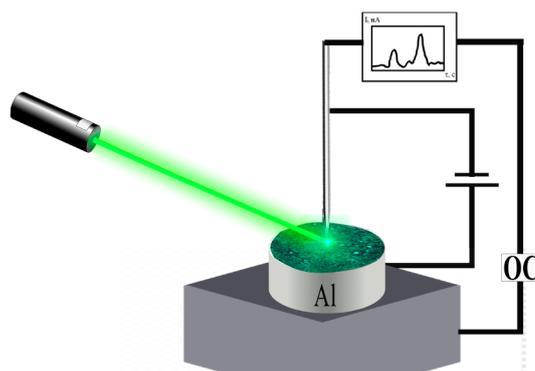


Рис. 1. Модифицированная схема СТМ модуля

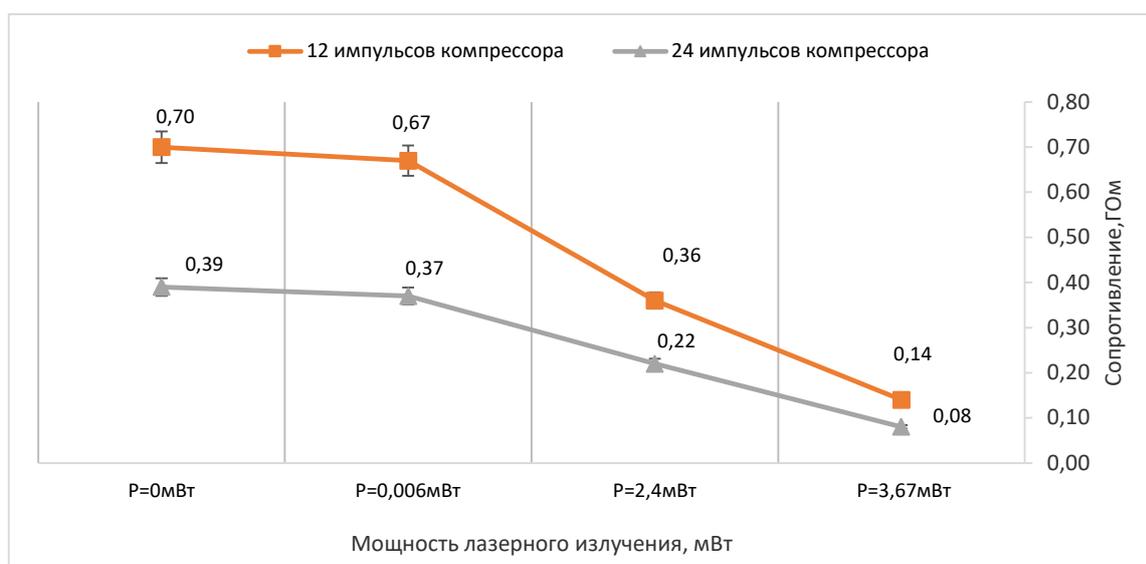


Рис. 2. Диаграмма зависимости сопротивления поверхности Au-C нанопленки от воздействия лазерного излучения

Литература

1. Kucherik, A., Arakelian, S., Vartanyan, T. et al. Laser-induced synthesis of metal-carbon materials for implementing surface-enhanced Raman scattering // Opt. Spectrosc. – 2016. – Vol. 121. – P. 263–270.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ, ОБРАЩЕННЫХ К ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ВОДОРОДНОЙ ПЛАЗМЕ

Лобанова Л.Г.

*Национальный исследовательский университет «МЭИ», институт
тепловой и атомной энергетики, Москва, Россия
E-mail: lida.lobanova.2017@mail.ru*

Рассмотрены источники ошибок, возникающие при создании количественной методики измерения содержания изотопов водорода в твердых телах с помощью спектроскопии пиков упруго отраженных электронов. Построена аналитическая модель процесса формирования пиков упруго отраженных электронов, позволяющая с точностью, не превышающей 2%, определять интенсивность пиков в случае анализа многокомпонентных твердых тел. Построена теоретическая модель процесса взаимодействия потоков легких ионов с твердыми телами. Создана методика расчета энергетических спектров отраженных легких ионов, учитывающая зависимость сечения рассеяния от энер-

гии и процессы перезарядки ионов при отрыве от поверхности мишени. Проведено сравнение расчетных спектров с экспериментальными данными, полученными разными авторами.

Материалы, обращенные к термоядерной плазме, подвержены целому комплексу разрушительных процессов. Для оценки их влияния необходимо знать следующие величины: полный коэффициент отражения, коэффициент отражения энергии, потери энергии падающих и отраженных ионов на упругие столкновения в приповерхностном слое. Наличие трития порождает проблему его контроля в конструкционных материалах.

Настоящая работа направлена на поиск решений указанных проблем. Традиционными методами измерения содержания изотопов водорода в материалах, обращенных к плазме, являются Nuclear Reaction Analysis (NRA) и Elastic Recoil Detection (ERD) [1]. Однако реализация этих методик требует наличия дорогостоящих ускорителей. Методики обработки результатов NRA и ERD анализов вызывает большое число справедливых замечаний. В отличие от крайне дорогостоящих и уникальных NRA и ERD установок в работе предлагается выполнять послойный анализ изотопов водорода на серийно выпускаемом оборудовании для электронной спектроскопии. В настоящей работе решается проблема точного учета влияния процесса многократного рассеяния на интенсивность пиков, сформированных электронами, упруго отраженными от отдельных компонент мишени сложного состава.

В работе для анализа процессов взаимодействия потоков легких ионов с твердыми телами использован метод инвариантного погружения Амбарцумяна, успешно апробированный для анализа процессов рассеяния электронов в твердых телах [2,3]. Метод основан на решении граничной задачи для уравнения переноса в малоугловом приближении, которое подразумевает малость отношения:

$$\zeta = \frac{x(\pi)}{x(0)} \quad 1)$$

где $x(\theta)$ – нормированное на единицу сечение упругого рассеяния частиц на угол θ . Для легких ионов неравенство (1) справедливо в более широком интервале энергий, чем для электронов.

Уравнение, описывающее плотность потока частиц, отразившихся от мишени, пройдя в ней путь s , записанное в малоугловом приближении, имеет вид:

$$\left(1 + \frac{\partial}{\partial s}\right) R_{el}(s, \mu_0, \mu) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} x(\mu_0, \mu) + \int_{-1}^0 R_{el}(s, \mu_0, \mu') x(\mu', \mu) d\mu' \quad 2)$$

где μ_0, μ – косинус угла падения и отражения соответственно, s – пробег, измеряемый в длинах среднего свободного пробега между упругими соударениями.

Для определения энергетических спектров отраженных легких ионов функция $T_{in}(z, \Delta)$, описывающая процессы неупругого взаимодействия частиц с электронной подсистемой, определялась в приближении непрерывного замедления: $T_{in}(z, \Delta) = \delta(\Delta - \bar{\epsilon}z)$, где $\bar{\epsilon}$ – средние потери энергии частицы на единице длины пути.

Для сравнения с экспериментальными данными необходимо учесть аппаратную функцию энергоанализатора, эффект Доплера, энергетическое уширение зондирующего пучка. Особенно важным для построения угловых и энергетических распределений является учет явления перезарядки.

При описании угловых распределений (рис. 1 А) производится фитинг расчетных данных с экспериментальными данными [4], на основе которого можно получить значения двух подгоночных параметров – параметра экранирования и параметра, определяющего эффективность процесса перезарядки. Дальнейшее описание энергетических спектров (рис. 1 В) требует знание таких параметров, как средние потери энергии на единице длины и страгглинга. Выяснено, что определенная при построении энергетиче-

ческих спектров величина средних потерь энергии совпадает данными из таблиц NIST (National Institute of Standard Technology).

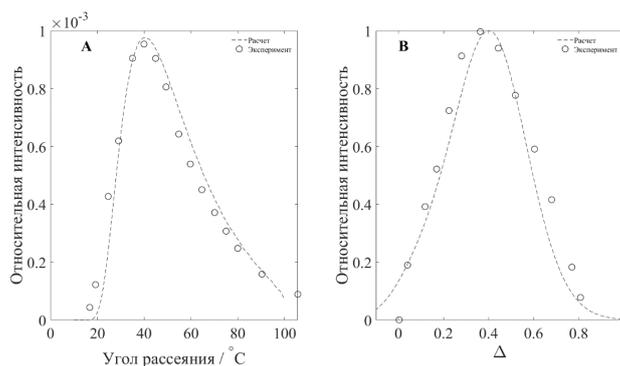


Рис. 1. А Угловое распределение протонов, отраженных от медной мишени, энергия зондирующего пучка 21.6 кэВ, угол падения 80°; В Энергетический спектр протонов, отраженных от медной мишени, энергия зондирующего пучка 30 кэВ, угол падения 80°, угол отражения 110°

Исследование проведено в Национальном исследовательском университете “МЭИ” при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания № FSWF – 2020 – 0023.

Литература

1. Schwarz-Selinger T., von Keudell A., Jacob W. Plasma chemical vapor deposition of hydrocarbon films: The influence of hydrocarbon source gas on the film properties // J. Appl. Phys. 1999. Vol. 86. P. 3988.
2. Afanas'ev V.P., Efremenko D.S., Kaplya P.S. Analytical and numerical methods for computing electron partial intensities in the case of multilayer systems // J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom. 2016. Vol. 210. P. 16-29.
3. Salvat-Pujol F., Werner W.S.M. Oswald-Kasper-Gaukler model for reflection electron energy loss spectroscopy // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 83. No. 19. P. 195416.
4. Morita K., Akimune H., Suita T. Scattering of Low Energy Hydrogen Ions (H_1^+ , H_2^+ and H_3^+) and Atoms (H_1^0) from Evaporated Films // Jpn. J. Appl. Phys. 1968. Vol. 7. No. 8. P. 916-926.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МЕЗОСКОПИЧЕСКИХ РЕЛАКСАЦИЙ НА МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТНЫХ НАНОСТРУКТУР

Локтионов И.А.¹, Бажанов Д.И.²

*МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики
твердого тела Москва, Россия*

E-mail: ia.loktionov@physics.msu.ru

Под мезоскопическим несоответствием принято понимать деформации поверхности и осажденных на них наноструктур, вызванные многочисленными эффектами, связанными с конечными размерами системы или принципиальным несопадением параметров решётки составляющих её материалов. Как было показано [1], не только в гетероэпитаксиальных, но и в гомоэпитаксиальных системах наблюдаются сложные и высокоанизотропные поля деформаций как в подложке, так и в осаждённой наноструктуре. В свою очередь, деформации решётки и магнетизм тесно связаны магнитоупругой связью, что отражается в зависимости магнитной анизотропии от деформаций. При исследовании нанометровых ферромагнитных плёнок оказалось, что даже небольшая деформация плёнки порядка 0,1% может вызывать существенное изменение эффективного коэффициента магнитоупругой связи [2].

В данной работе исследуется, как релаксации, индуцируемые мезоскопическим несоответствием, влияют на магнитные свойства наноструктур: отдельных атомов, димеров и цепочек кобальта и железа на поверхности меди Cu(001) и нитридизированной поверхности Cu₂N/Cu(001). Для этого проводятся первопринципные расчёты как с учётом, так и без учёта структурных релаксаций и теоретическое исследование магнитоупругой связи для этих систем. Анализируются локальные магнитные моменты атомов и магнитная анизотропия в структурах. Предпринимается попытка описать релаксации поверхности меди с островками кобальта и меди в рамках континуальной теории упругости с использованием подхода, предложенного в работе [3], в котором рассматривается поверхностное напряжение как одно из проявлений мезоскопического несоответствия.

Литература

1. O. O. Brovko, D. I. Bazhanov, H. L. Meyerheim, D. Sander, V. S. Stepanyuk, and J. Kirschner, Surf. Sci. Rep. 69, 159 (2014).
2. D. Sander, Rep. Prog. Phys. 62 (5) (1999) 809–858.
3. R. Kern, P. Müller, Surf. Sci. 392 (1–3) (1997) 103–133.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЧАСТОТНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ДИНАМИЧЕСКОЙ ПРОВОДИМОСТИ В LuB₁₂

Макрушин М.А.¹, Красиков К.М.², Арсеев П.И.³, Случанко Н.Е.²

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

² Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

³ Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук
969max969@mail.ru

Доклад посвящен изучению сильно коррелированных электронных систем (СКЭС). СКЭС представляются перспективными как для практических применений, так и с точки зрения фундаментальных научных исследований [1,2]. Среди СКЭС наиболее известны высокотемпературные сверхпроводники [3], манганиты с колоссальным магнетосопротивлением [4]. Анализ подобных систем зачастую оказывается затрудненным в силу сложности многочастичной задачи и отсутствия высокой симметрии у элементарной ячейки таких соединений. В то же время, среди различных СКЭС выделяется семейство редкоземельных (РЗ) додекаборидов RB₁₂, в которых электронная и структурная неустойчивости наблюдаются в соединениях со сравнительно простой ГЦК решеткой. Одним из представителей семейства РЗ додекаборидов является сверхпроводник LuB₁₂ (T_c~0.4К).

Предметом теоретического исследования является моделирование частотной зависимости динамической проводимости $\sigma(\omega)$ этого металла. В работе предпринята попытка объяснить возникновение, наряду с Друде – вкладом, коллективных мод, проявляющихся в виде дополнительных пиков $\sigma(\omega)$ на характерных частотах 400-800 см⁻¹. В ходе анализа, основанного на решении уравнения Больцмана (1) для электронов

$$\partial_t \delta n_1 + e(E_0 + E_{\text{dipol}}) \partial_p n = \frac{(\delta n_2)}{\tau} \quad (1)$$

методами теории возмущений (возмущающей силой выступает внешнее электрическое E_0 и внутреннее E_{dipol} дипольное поля), выяснено, что дополнительная компонента в проводимости может возникнуть в силу появления дополнительного поля, имеющего дипольный характер и создаваемого внутренними колебаниями системы. В работе также выполнено сопоставление результатов расчетов с экспериментальными спектрами соединений RB₁₂.

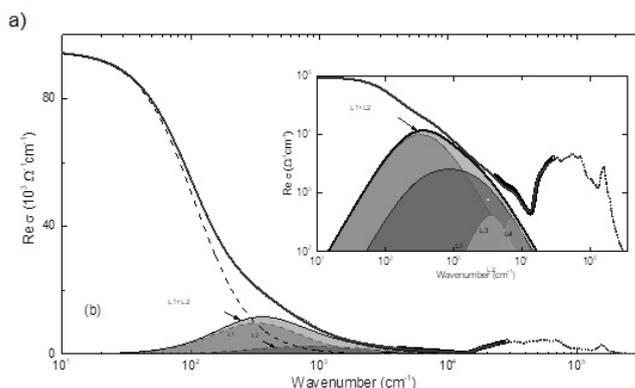


Рис. 1. Частотные зависимости динамической части проводимости для LuB12. Отдельно выделены проводимость электронного газа (Друде-компонента, показана пунктиром) и дополнительные характерные лоренцианы.

Литература

1. Elbio Dagotto, "Complexity in Strongly Correlated Electronic Systems" *Science* 309, 257 (2005)
2. B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, and J. Zaanen, "From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides" *Nature (London)* 518, 179 (2015)
3. M. Vojta, "Lattice symmetry breaking in cuprate superconductors: stripes, nematics, and superconductivity" *Adv. Phys.* 58, 699 (2009)
4. A. Moreo, S. Yunoki, and E. Dagotto, "Phase Separation Scenario for Manganese Oxides and Related Materials" *Science* 283, 2034 (1999)
5. B. Gorshunov, E. Zhukova, G. Komandin, et al. "Collective infrared excitation in the cage-glass LuB₁₂" *JETP Letters* 107, (2018)

РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ MoS₂/WS₂

Муксунов Н.Я.

Северо-Восточный федеральный университет им. М. К. Аммосова, физико-технический институт, Якутск, Россия

E-mail: muksunov97@mail.ru

В последнее время исследования электронных и оптоэлектронных устройств на основе монослоя MoS₂, получили дальнейшее развитие по следующим причинам. Во-первых, было обнаружено, что монослои MoS₂, имеют прямую запрещенную зону 1,8 эВ с сильной фотолюминесценцией. Во-вторых, на основе монослоя MoS₂ были изготовлены полевые транзисторы с высокой подвижностью заряда. В-третьих, монослой MoS₂ имеет запрещенную зону с двумя впадинами и сильной спин-долинной связью. Все это открывает новые возможности в области долиноэлектроники. Другой перспективный материал – монослой WS₂, который впервые получен в работе и обладает свойствами, близкими к свойствам монослоя MoS₂. Все вышесказанное, естественно, побуждает исследовать электронные свойства многослойных дихалькогенидов переходных металлов.

Появление многослойных дихалькогенидов переходных металлов в качестве новых двумерных полупроводниковых материалов открывает новые возможности для теоретических и экспериментальных исследований [1, 2]. Вертикально уложенные ван-дер-ваальсовы гетероструктуры дихалькогенидов переходных металлов являются основой для создания новых гетероструктур.

В данной работе на основе метода функционала плотности произведен расчет электронного спектра простейшего случая, бислоя MoS_2 и WS_2 .

В качестве инструмента *ab initio* расчетов использовался пакет Quantum Espresso. *Ab initio* моделирование проводилось с использованием обобщенного градиентного приближения (GGA). Для ускорения сходимости в расчетах выбрана величина энергии «обрезания» $E_{\text{cut}}=40 \text{ Ry}$. Во избежание взаимодействия между слоями расстояние между ними устанавливалось равным 20 \AA .

Р асчеты показали, что максимум валентной зоны бислоя MoS_2/WS_2 в точке Γ сильно зависит от межслоевого взаимодействия в гетероструктуре. При увеличении расстояния между слоями MoS_2 и WS_2 , гетероструктура MoS_2/WS_2 постепенно переходит из полупроводника с непрямой запрещенной зоной в полупроводник с прямой запрещенной зоной.

Литература

1. Shih C. K. Coherently strained in-plane atomic layer heterojunctions //NPG Asia Materials. – 2015. – Т. 7. – №. 12. – С. e231-e231.
2. Huang C. et al. Lateral heterojunctions within monolayer MoSe_2 – WSe_2 semiconductors //Nature materials. – 2014. – Т. 13. – №. 12. – С. 1096-1101.. *Nat. Mater.* 13, 1096–1101 (2014).

ЛАЗЕРНАЯ ФРАГМЕНТАЦИЯ КРЕМНИЕВЫХ МИКРОЧАСТИЦ В ВОДЕ НАНО- И ПИКОСЕКУНДНЫМИ ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ

Нестеров В. Ю., Шулейко Д. В., Колчин А. В.

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

E-mail: n.slawa2011@yandex.ru

Метод лазерной фрагментации в жидкостях является относительно простым и эффективным способом формирования наночастиц из более крупных частиц [1]. В частности, лазерная фрагментация кремниевых микрочастиц (КМЧ) в наночастицы позволяет получать структуры для биофотоники [2], нелинейной оптики и плазмоники [3]. В настоящее время представляет интерес сравнение структурных свойств кремниевых наночастиц (КНЧ), формируемых методом фрагментации лазерными импульсами различной длительности.

В данной работе для изготовления наночастиц была применена технология лазерной фрагментации предварительно механически размолотого кремния в виде кремниевых микрочастиц (КМЧ) размером 1–8 мкм в форме многогранников с явно выраженными гранями и острыми вершинами (рис. 1а), находящихся в различных начальных концентрациях (0,5–15,0 мг/мл) в виде взвеси в кювете с водой, облучаемой лазерными импульсами в течение различного времени. Облучение осуществлялось с помощью следующих источников мощного излучения: наносекундного YAG:Nd Solar LS LQ629 (1064 нм, 12 нс, 200 мДж, 100 Гц) или пикосекундного YAG:Nd EKSPLA PL 2143A (1064 нм, 34 пс, 16 мДж, 10 Гц) лазеров.

Было показано, что метод лазерной фрагментации взвесей КМЧ в дистиллированной воде позволяет формировать КНЧ, обладающих сферической симметрией и гладкой формой (рис.1б). На основании комплексного исследования с использованием методик растровой электронной микроскопии (РЭМ), динамического рассеяния света (ДРС) и спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) были получены данные о размерах и степени кристалличности изготовленных КНЧ, а также изучены взаимосвязи между структурными свойствами наночастиц и режимами их формирования.

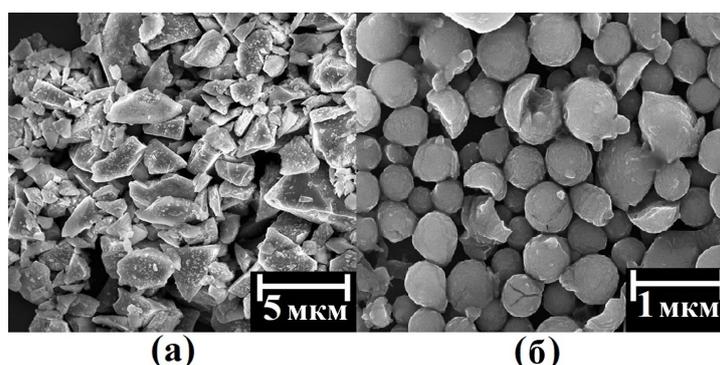


Рисунок 1. РЭМ-изображения (а) исходного микропорошка и (б) фрагментированных КНЧ.

Использование пикосекундного лазера в качестве источника излучения для лазерной фрагментации позволило получить КНЧ со средними размерами, немонотонно изменяющимися в диапазоне 110–165 нм в зависимости от начальной концентрации КМЧ. Так, при малых концентрациях исходных КМЧ (0,5–5,0 мг/мл) с ростом их концентрации наблюдалось увеличение среднего размера КНЧ от 110 до 165 нм. Это объясняется увеличением экстинкции падающего излучения и, как следствие, падением эффективности его фокусировки в объёме взвеси, что приводит к менее эффективной фрагментации КМЧ [2]. Однако при дальнейшем увеличении концентрации взвеси КМЧ от 5,0 до 12,0 мг/мл средний размер сформированных КНЧ уменьшался от 165 до 146 нм, что связано с увеличением поглощения лазерного излучения в приповерхностном слое взвеси. При этом экстинкция падающего излучения уменьшалась, а эффективность фрагментации увеличивалась [2].

В случае облучения взвесей КМЧ лазерными импульсами наносекундной длительности средний размер формируемых частиц оказался значительно большим и составил 800–1200 нм. Отметим, что при малых концентрациях (0,5–1 мг/мл) также наблюдалось формирование заметной фракции частиц меньшего размера (~200 нм), что может объясняться повторной фрагментацией частиц и отсутствием слипания фрагментов при меньшей общей концентрации исходного микропорошка.

Согласно данным спектроскопии КРС, сформированные во всех случаях КНЧ имели кристаллическую структуру.

Таким образом, показано, что метод лазерной фрагментации КМЧ в воде позволяет получать КНЧ различных размеров, зависящих как от длительности лазерных импульсов, так и от начальной концентрации микропорошка. В случае абляции пикосекундными импульсами размер фрагментированных частиц меньше, и они могут быть использованы в приложениях биофотоники, а в случае обработки наносекундным излучением размер частиц сравним с длиной волны, что открывает перспективы их применения в полупроводниковой плазмонике.

Авторы выражают благодарность Д. Е. Преснову за получение РЭМ-изображений, С. В. Заботнову и Л. А. Голованю за постановку задачи исследования и полезные обсуждения.

Литература

- [1] A. Al-Kattan, V.P. Nirwan, A. Popov, et al. Recent advances in laser-ablative synthesis of bare Au and Si nanoparticles and assessment of their prospects for tissue engineering applications // *Int. J. Mol. Sci.* 2018. Vol. 19, art. 1563.
- [2] В.Ю.Нестеров, О.И.Соколовская, Л.А.Головань и др. Лазерная фрагментация кремниевых микрочастиц в жидкостях для решения задач биофотоники // *Квантовая электроника.* 2022. Т. 52, № 2, с. 160–170.
- [3] S.O. Gurbatov, V. Puzikov, A. Cherepakhin, et al. Hybrid Au@Si microspheres produced via laser irradiation in liquid for nonlinear photonics // [Opt. Laser Technol.](#) 2022. Vol. 147, art. 107666.

СИНТЕЗ И ОЦЕНКА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ДИАМЕТРОВ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В ВЕРТИКАЛЬНО ОРИЕНТИРОВАННОМ МАССИВЕ

Никитина Е. В., Сим В. С., Лянгузов Н. В.

Южный федеральный университет, физический факультет,
г. Ростов-на-Дону, Россия
e-mail: nikitina.jenia@gmail.com

Целью данной работы является оптимизация процессов синтеза массивов ВО-УНТ, а также анализ распределения диаметров нанотрубок в массивах на основе полученных спектров комбинационного рассеяния света (КРС).

Для синтеза вертикально ориентированного массива углеродных нанотрубок использована методика каталитического химического осаждения из газовой фазы. Показана возможность снижения концентрации прекурсора углерода — ацетилена — до 0.2%. Предложен альтернативный прекурсор катализатора — ацетат железа трехвалентного. Диаметры углеродных нанотрубок в массивах оценены на основе их спектров комбинационного рассеяния света. С учетом того, что радиальные дыхательные моды имеют резонансный характер, а их частоты существенно зависят от окружения, для выявления характеристик распределения диаметров нанотрубок рассмотрен способ анализа формы профиля G-полосы.

Спектры КРС ВО-УНТ зарегистрированы на спектрометре Renishaw in Via при возбуждении на длинах волн 514 nm (Ar⁺-лазер) и 633 nm (He-Ne-лазер) со спектральным разрешением $\sim 1.5 \text{ cm}^{-1}$. Наблюдались характерные для УНТ радиальные дыхательные моды (РДМ, англ. RBM) и расщепленная на TO⁻ и LO⁻ компоненты G-полоса. Присутствуют также обусловленные дефектами или наличием частиц аморфного углерода D- и D'-компоненты. Их относительная интенсивность резко уменьшается при снижении содержания ацетилена до 0.2% при синтезе.

Далее мы проанализировали G-моды УНТ, имеющие гораздо меньшую чувствительность к окружению и менее резонансный характер возбуждения, нежели РДМ [1,2]. На рис. 1В представлен экспериментальный КРС-спектр G-области ВО-УНТ и результат его разложения на составляющие контуры. Для аппроксимации G(LO)-компоненты использована единичная линия функции Лоренца с полной шириной на середине высоты (FWHM), равной 24 cm^{-1} .

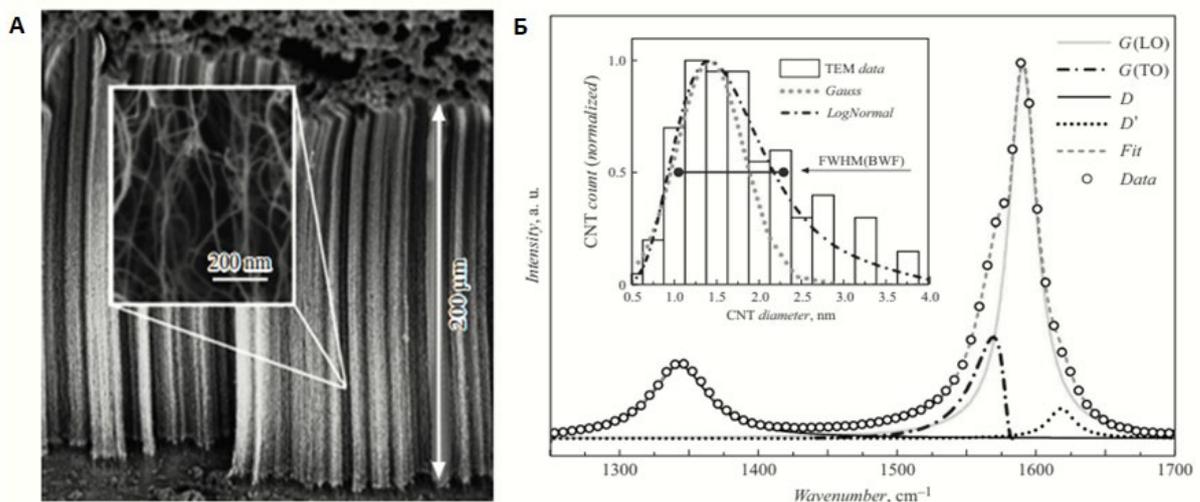


Рис.1. А– СЭМ-изображение торца скола массива ВО-УНТ. На вставке — более детальное СЭМ-изображение, Б – D- и G-области спектра КРС массива ВО-УНТ при возбуждении на длине волны 514 nm.

Для массива УНТ ее можно рассмотреть, как суперпозицию соответствующих мод отдельных УНТ с разными диаметрами на различных частотах. Поэтому профиль G(TO)-компоненты должен представлять собой свертку спектрального отклика каждой УНТ со статистической функцией их распределения по диаметру. Зависимость спектрального положения G(TO)-моды от диаметра УНТ [1] определяется соотношением [3]: $\omega_{TO}(d) = A - B/d^2$, где $A = 1582 \text{ cm}^{-1}$, $B = 27.5 \text{ nm}^{-2}$. Из формулы следует, что для массива УНТ некоторое их количество с большим диаметром вносит больший вклад в интенсивность профиля G(TO) на большей частоте, чем то же количество с меньшим диаметром на меньшей частоте.

Таким образом, в работе показано, что жидкофазный метод подготовки каталитически активированных подложек позволяет синтезировать массивы ВО-УНТ с преимущественной долей одностенных УНТ, а продолжительности отжига КА в восстановительной среде в течение 5 min и содержания газа прекурсора углерода 0.2% вполне достаточно для достижения их роста. Выявление распределения УНТ по диаметрам более корректно, с нашей точки зрения, проводить на основе анализа не РДМ-области спектров КРС, а G-области. Применение здесь функции логнормального распределения УНТ по диаметрам дает наилучшее воспроизведение прямых статистических данных.

Литература

1. D.I. Levshov, H.N. Tran, M. Paillet, R. Arenal, X.T. Than A.A. Zahab, Y.I. Yuzyuk, J.-L. Sauvajol, T. Michel, Carbon, 114, 141 (2016).
2. S. Rochal, D. Levshov, M. Avramenko, R. Arenal, T.T. Cao, V.C. Nguyen, J.-L. Sauvajol, M. Paillet, Nanoscale, 11, 16092 (2019).
3. H. Telg, J.G. Duque, M. Staiger, X. Tu, F. Hennrich, M.M. Kappes, M. Zheng, J. Maultzsch, C. Thomsen, S.K. Doorn, ACS Nano, 6, 904 (2012).

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ И МИКРОСКОПИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРОЕНИЯ 3D РАЗВИТОЙ ПОВЕРХНОСТИ МАССИВОВ КРЕМНИЕВЫХ НАНОНИТЕЙ

А. К. Пелагина, Е. В. Парина

*Воронежский государственный университет, Воронеж
pisliaruk@phys.vsu.ru*

Массивы нанонитевидного кремния (НК), сформированные методом металл-ассистированного жидкофазного химического травления, являются перспективным и актуальным наноматериалом. Данные объекты обладают огромным спектром физико-химических свойств, таких как устойчивая интенсивность фотолюминесценции при комнатной температуре, низкий коэффициент отражения др. Перспективными являются и структуры, в которых массивы НК используются для функционализации их чрезвычайно развитой поверхности, которая достигается путем осаждения или покрытия другими по свойствам материалами матрицы нитевидного кремния.

Актуальными вопросами являются исследования атомного и электронного строения экспериментальными рентгеноспектральными методами, дающими прямую информацию о специфике локального атомного окружения и физико-химическом состоянии. Известно, что метод спектроскопии ближней тонкой структуры края рентгеновского поглощения (*XANES - X-rayabsorptionnearedgestructure*) дает информацию о локальной парциальной плотности свободных электронных состояний вблизи дна зоны проводимости. Также метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (*XPS - X-rayPhotoelectron-Spectroscopy*) позволяет получать информацию об особенностях физико-химического состояния массивов нитевидного кремния. Использование высокоин-

тенсивного синхротронного излучения установок класса "мегасайенс" является необходимым условием регистрации спектров высокого разрешения, особенно, когда речь идет о наноматериалах, которые, как правило, характеризуются малым количеством материала. Наконец, наиболее разрешенными энергетически являются спектры *XANES* и *XPS*, полученные при возбуждении неглубоких остовных уровней в ультрамягком рентгеновском диапазоне длин волн. Это приводит к чрезвычайной чувствительности рентгеноэлектронных спектров к поверхности. С другой стороны, исследования наноструктур, таких как НК, требуют понимания специфики атомного и электронного строения в глубине массива нанообъектов, там, где они имеют развитую поверхность, недоступную в целом для диагностических возможностей метода *XANES* и *XPS* и иных методик, обладающих поверхностной чувствительностью (Оже- электронная спектроскопия, др.).

В работе нами предложен метод, позволяющий получить информацию о физико-химическом состоянии, атомном и электронном строении поверхностей глубоких слоев массива нитевидного кремния. Морфология образцов НК, сформированных в различных режимах, была изучена методом сканирующей электронной микроскопии. Далее для достижения 3D-развитой части формируемого массива НК в глубине массива нитей поверхностно-чувствительными методами *XANES* и *XPS* половина площади поверхности каждого образца механически удалялась путем однократного проведения специально подготовленным лезвием в перчаточном шкафу (*glove-box*) в инертной атмосфере аргона, препятствующей модифицирующему взаимодействию с атмосферным кислородом. Далее механически модифицированные образцы через шлюзовую камеру устанавливались в объем многокамерной системы спектрометра Российско-германского канала синхротронного накопительного кольца *BESSY II (Helmutz-Zentrum-Berlin)* без контакта с атмосферой.

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

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

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

АНАЛИЗ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ТЕПЛОЁМКОСТИ КЛАТРАТОВ СЕДЬМОГО ТИПА НА ОСНОВЕ ФОСФОРА И НИКЕЛЯ В ТЕМПЕРАТУРНОЙ ОБЛАСТИ 2 — 300 К.

К.С. Пилипенко¹, А.В. Матовников¹, Н.В. Митрошенков¹, А.В. Шевельков²,
В.В. Новиков¹

¹Брянский государственный университет имени И.Г.

Петровского, Брянская физическая лаборатория, Брянск, Россия

²МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва, Россия

E-mail: www-kirill.pilipenko@yandex.ru; shev@inorg.chem.msu.ru

Неорганические клатраты VII-го типа могут существовать в двух структурных формах. Одна из таких форм — так называемая «правильный» клатрат, например $BaNi_2P_4$, тогда как $SrNi_2P_4$, $BaCu_2P_4$ и $EuNi_2P_4$ представляют собой своеобразные искаженные клатраты VII-го типа. Эти соединения синтезируют двухстадийным ампульным методом. В кристаллической структуре обоих типов есть только один тип 24-вершинных многогранников, только в $BaNi_2P_4$ он имеет вид усеченного кубооктаэдра, а в остальных трёх клатратах имеет вид искаженного, закрученного многогранника, называемого *полиэдр Кельвина*. Анализ транспортных свойств подтверждает наличие металлических свойств клатратов VII-го типа. В то же время, они обладают высокими электрическими характеристиками: удельное сопротивление при комнатной температуре и коэффициент Зеебека, достигающий $300 \text{ В} \cdot \text{К}^{-1}$, что нетипично для обычных металлов. Кроме того, их теплопроводность достаточно низкая, от 2 до $4 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$ [1].

Нами было проведено экспериментальное исследование теплоемкости $C_p(T)$ клатратов VII-го типа $SrNi_2P_4$ и $BaNi_2P_4$ в диапазоне температур от 2 до 300 К. Наблюдаемые аномалии (размытые максимумы) вблизи 5 К на температурных зависимостях теплоемкости, по нашему мнению, связаны с влиянием двухуровневых систем в подрешётках гостевых атомов. Совместный анализ температурных зависимостей теплоемкости и объема элементарной ячейки для обоих клатратов в рамках модели Дебая–Эйнштейна позволил определить характеристические температуры клатратных каркасов и гостевых атомов, а также параметры двухуровневых систем.

Работа выполнена при поддержке гранта российского научного фонда № 16-12-00004.

Литература

1. *Dolyniuk, J.-a.* Twisted Kelvin Cells and Truncated Octahedral Cages in the Crystal Structures of Unconventional Clathrates, AM_2P_4 (A = Sr, Ba; M = Cu, Ni) / J.-a. Dolyniuk [et al.] // *Chemistry of Materials*. — 2015. — Vol. 4. — P. 1—9.

РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ НА СТАНЦИИ РСА/БЕЛОК НА ПРИМЕРЕ СТРУКТУРЫ КОМПЛЕКСА ЦИНКА С N-[2-(ГИДРОКСИАЛКИЛИМИНОМЕТИЛ)ФЕНИЛ]-4-МЕТИЛБЕНЗОЛСУЛЬФОАМИДА

В.А. Поспелов

Московский Физико-Технический Институт (Национальный

Исследовательский Университет), Институт Нано-, Био-

Информационных и Социогуманитарных наук и Технологий, Москва, Россия

E-mail: pospelov.va@phystech.edu

Станция «Белок» Курчатовского Комплекса Синхротронных и Нейтронных Исследований была введена в эксплуатацию в 2004 году. Она спроектирована для использования методов макро/низкомолекулярной кристаллографии на монокристаллах, ди-

фракции на порошках. Цель исследования – расшифровка трехмерной структуры образцов. Объектами исследования являются молекулярные кристаллы органических, элементоорганических, координационных и кластерных соединений, молекулярные магнетики, (люминесцентные) OLED материалы, органическая фотовольтаика, прекурсоры MOCVD. Однако главным недостатком станции была ее короткая длина – из-за этого на ней невозможно было выполнить условие горизонтальной фокусировки сагиттально изогнутого кристалла для нужной длины волны, что ослабляло поток фотонов с зеркала на монохроматор и влияло на расходимость в фокусе. Это значительно влияло на качество получаемых данных. В результате в 2017 году было принято решение перенести дифрактометр со станции «Белок» на станцию «РСА, ключевым аргументом послужила схожесть оптических схем станций, указанных на рис.1 и 2. В результате станции объединили в одну с новым названием «РСА/Белок».

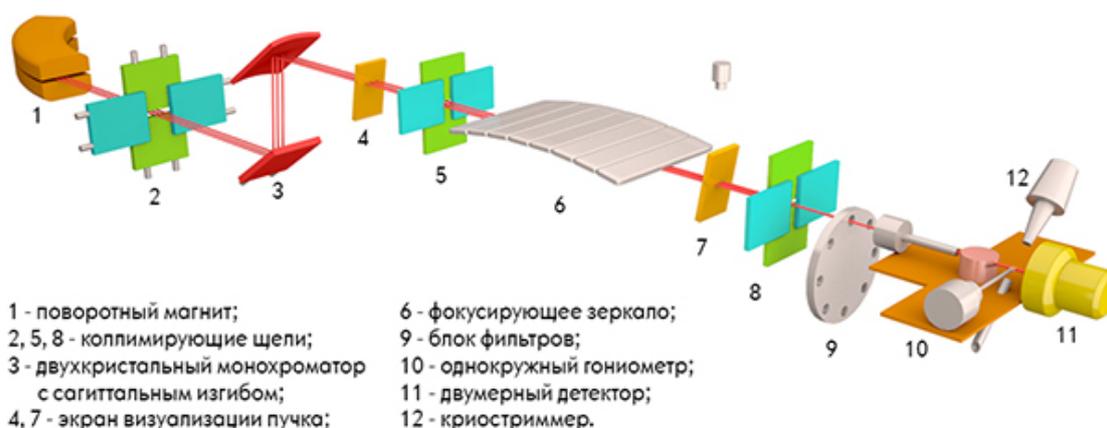


Рис. 1. Рентгенооптическая схема станции «Белок» и перечень всех ее оптических элементов [3]

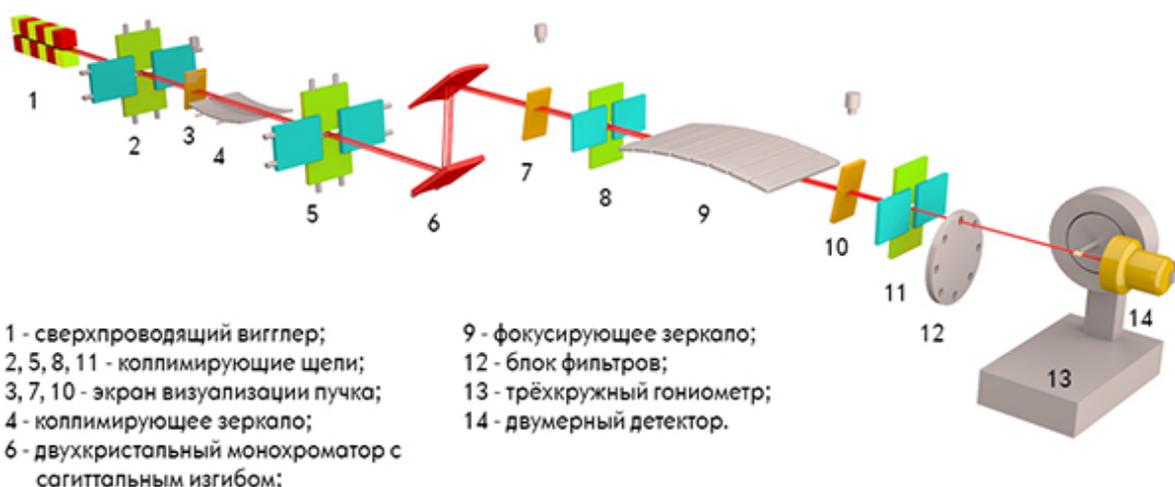


Рис. 2. Рентгенооптическая схема станции «РСА» и перечень всех ее оптических элементов [4]

Объединение станций повысило яркость фотонного потока и, как следствие, улучшило качество экспериментов по дифракции на монокристаллах, что будет продемонстрировано в данной работе. Автором также проведено исследование по дальнейшему увеличению яркости потока фотонов, в результате модификации рентгенооптической схемы станции.

Для сравнения качества данных был выбран кристалл комплекса цинка (II) с N-[2-(гидроксиалкилиминометил) фенил]-4-метилбензолсульфоамидом. Соединение было синтезировано и закристаллизовано группой ученых из Института физической и орга-

нической химии Южного федерального университета, включая В.Г. Власенко и А.С. Бурлова, и передано Национальному Исследовательскому Центру «Курчатовский Институт» для исследования его структуры [1]. Комплексы цинка (II) двух-, трех- и тетраденатных азометиновых лигандов являются эффективными металлсодержащими люминофорами. Благодаря своим фото- и электролюминесцентным (EL) свойствам, синтетической доступности, высокой термостойкости и вакуумной сублимации для получения однородных пленок при производстве слоев OLED, комплексы цинка с азометиновыми лигандами являются предметом многочисленных исследований в качестве перспективных материалов для эмиссионных или проводящих слоев в технологии OLED. В связи с этим синтез новых комплексов цинка с азометиновыми лигандами, обладающих координационным узлом ZnN_4 , является важной и актуальной проблемой современной координационной химии.

Данное соединение вначале было изучено на станции «EXAFS», где было исследовано локальное атомное строение ионов цинка в комплексе, так как не нашли способа закристаллизовать вещество. Вскоре способ нашелся и закристаллизованный образец изучили на «Белке», однако качество данных было посредственным. Поэтому этот образец был перемерен на новой станции и в результате были получены дифракционные данные более высокого качества [2].

Выражаю отдельную благодарность своему научному руководителю Лазаренко Владимиру Александровичу за советы по выбору соединений для исследования, планированию и оформлению доклада.

Литература

1. Burlov A. S. et al. Complexes of zinc (II) with N-[2-(hydroxyalkyliminomethyl) phenyl]-4-methylbenzenesulfonamides: synthesis, structure, photoluminescence properties and biological activity //Polyhedron. – 2018. – Т. 144. – С. 249-258.
2. Vlasenko V. G. et al. Synthesis, crystal structure and magnetic properties of copper (II) complexes with 4-methyl-N-[2-[(E)-2-pyridyl [alkyl] iminomethyl] phenyl] benzenesulfamide ligands //Journal of Molecular Structure. – 2020. – Т. 1203. – С. 127450.
3. Курчатовский Комплекс Синхротронных и Нейтронных Исследований (ККСНИ), станция «Белок»: <http://kcsni.nrcki.ru/pages/main/sync/beamlines/belok/index.shtml>
4. Курчатовский Комплекс Синхротронных и Нейтронных Исследований (ККСНИ), станция «РСА»: <http://kcsni.nrcki.ru/pages/main/sync/beamlines/rsa/index.shtml>

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ПЕРЕМЕШИВАНИЯ СЛОЕВ В МНОГОСЛОЙНЫХ СТРУКТУРАХ НА ОСНОВЕ ПАРЫ МАТЕРИАЛОВ W/BE

Сахоненков С.С., Филатова Е.О.

*Санкт-Петербургский государственный университет, ул. Ульяновская, д.1,
Петродворец, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: sergei.sakhonenkov@gmail.com*

Вольфрам и бериллий являются перспективными материалами для применения в короткопериодных многослойных рентгеновских зеркалах, предназначенных для работы в широком диапазоне энергий. Согласно результатам, представленным в работах [1-3], между слоями данных материалов может происходить перемешивание с образованием WBe_x . Формирование на границах раздела перемешанных слоев может в значительной степени снижать оптический контраст между базовыми слоями, в следствие чего ухудшаются оптические характеристики зеркала. Отсюда видна необходимость определения химического состава переходных слоев и способов подавления формирования соединений на границах.

В работе было проведено систематическое исследование формирования переходных областей в многослойных короткопериодных структурах W/Be. Все структуры бы-

ли синтезированы методом магнетронного распыления. В качестве основного метода исследования применялась рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия. Для получения достоверных и стабильных данных измерения проводились на нескольких экспериментальных установках. Дополнительными методами исследований являлись просвечивающая электронная микроскопия и рентгеновская рефлектометрия.

Для изучения влияния порядка осаждения слоев W и Be на состав и ширину переходных областей в исследуемых структурах были синтезированы модельные образцы подложка/X(40 нм)/Y(1 - 4 нм). В результате было получено, что в переходных областях формируется бериллид вольфрама, а его стехиометрия зависит от материала осаждаемых атомов. Итоговый переходный слой представляет собой бериллид, близкий по стехиометрии к WBe_2 в случае осаждения W на Be. Осаждение Be на W приводит к формированию бериллида, близкого по стехиометрии к WBe_{12} [4].

Для определения основных механизмов, ответственных за наблюдаемую асимметрию в химическом составе переходных областей в зависимости от порядка осаждаемых атомов, была рассмотрена теоретическая модель формирования перемешанных областей при синтезе методом магнетронного распыления. Результаты теоретических рассмотрений и расчетов показали, что в качестве основного механизма перемешивания слоев в случае осаждения Be на W является механическое проникновение атомов при напылении, а в случае осаждения W на Be помимо механического проникновения также большую роль играет минимизация свободной поверхностной энергии.

Изучение короткопериодных структур W/Be с периодами 2.5 нм и 3.2 нм показало, что слои вольфрама полностью перемешиваются со слоями бериллия с образованием бериллидов, близких по стехиометрии к WBe_2 и WBe_{12} . В структуре с большим периодом также присутствует элементный бериллий. Было установлено, что обнаруженное перемешивание в многослойных структурах W/Be приводит к значительным отличиям реальных коэффициентов отражения зеркал от теоретически рассчитанных для идеального случая (когда между слоями нет перемешивания).

Исследования проводились с использованием комплексного фотоэлектронного спектрометра Thermo Fisher Scientific Escalab 250xi ресурсного центра «физические методы исследования поверхности», просвечивающего электронного микроскопа Zeiss Libra 200FE междисциплинарного ресурсного центра «нанотехнологии» научного парка СПбГУ, лабораторного модуля ЭСХА станции НаноФЭС установленной в синхротроне «КИСИ-Курчатов», станции P22 HAXPES синхротронного центра PETRA-III и станции Reflectometer синхротронного центра BESSY-II.

Работа была выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, грант 19-72-20125.

Литература

1. A. Wiltner Surface alloying of thin beryllium films on tungsten // A. Wiltner, C. Linsmeier, New J. Phys. –2006 –V. 8. –С. 181
2. A. Wiltner Structural investigation of the Be–W intermetallic system // A. Wiltner, F. Kost, S. Lindig, Ch. Linsmeier, Phys. Scr. –2007. –V. 128. –С. 133–136
3. M. Köppen Interaction of energetic oxygen ions with the beryllium tungsten alloy Be₂W // M. Köppen, J. Riesch, A. Vollmer, Ch. Linsmeier, Phys. Scr. –2011. –V. 145. –С. 014015
4. S.S. Sakhonenkov Interface formation between Be and W layers depending on its thickness and ordering // S.S. Sakhonenkov, E.O. Filatova, Appl. Surf. Sci. –2019. –V. 534. –С. 147636

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ СВЕРХТОНКОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОНОКРИСТАЛЛОВ БОРАТА ЖЕЛЕЗА FeVO_3

Снегирёв Н.И., Старчиков С.С.

*Институт кристаллографии им А.В. Шубникова
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Москва, Россия
E-mail: niksnegir@yandex.ru*

В настоящее время кристаллы FeVO_3 являются ключевым элементом как рентгеновские фильтры, в синхротронных установках при проведении спектроскопических исследований, основанных на ядерном резонансе [1,2]. Они используются в качестве уникальных монохроматоров синхротронного излучения, которые необходимы и широко востребованы для использования в экспериментальных установках на синхротронах третьего и четвертого поколения [1,2]. С появлением метода синхротронной мёссбауэровской спектроскопии стало крайне важным знать детали сверхтонкой структуры в спектрах кристаллов FeVO_3 , особенно в области температур вблизи точки Нееля.

В работе выполнены прецизионные измерения параметров сверхтонкого взаимодействия для атомов железа в монокристалле FeVO_3 в широком диапазоне температур, в особенности в области температуры магнитного фазового перехода.

Применение теоретических методик к анализу экспериментальных мёссбауэровских спектров позволило получить информацию и точные численные значения таких параметров, как эффективное магнитное поле на ядре атомов железа, константа электрического квадрупольного взаимодействия и изомерный сдвиг.

Установлено, что в кристалле FeVO_3 реализуется комбинированное магнитное дипольное и электрическое квадрупольное взаимодействие. Градиент электрического поля (ГЭП) на ядрах ^{57}Fe в борате железа обладает аксиальной симметрией, параметр асимметрии $\eta = 0$. Главная ось ГЭП совпадает с кристаллографической осью [001] и ортогональна магнитным моментам, лежащим в плоскости (001). Эта взаимная ориентация сохраняется в широком диапазоне температур 5 – 400 К, включая область магнитного фазового перехода.

Показано, что появление двух дополнительных резонансных линий в сверхтонкой структуре существенно влияет на форму спектров FeVO_3 вблизи температуры Нееля ($T_N \sim 348$ К, см. рисунок 1).

Показано, что появление двух дополнительных резонансных линий в сверхтонкой структуре существенно влияет на форму спектров FeVO_3 вблизи температуры Нееля ($T_N \sim 348$ К, см. рисунок 1).

Полученные результаты будут важны для применения кристаллов FeVO_3 в новых высокотехнологичных отраслях, включая оптоэлектронику и синхротронные технологии.

Авторы выражают благодарность С.В. Ягупову и М.Б. Стругацкому (КФУ им. В.И. Вернадского) за подготовку экспериментальных образцов, М.А. Чуеву (Физико-технологический институт им. К.А. Валиева РАН) за математический анализ экспери-

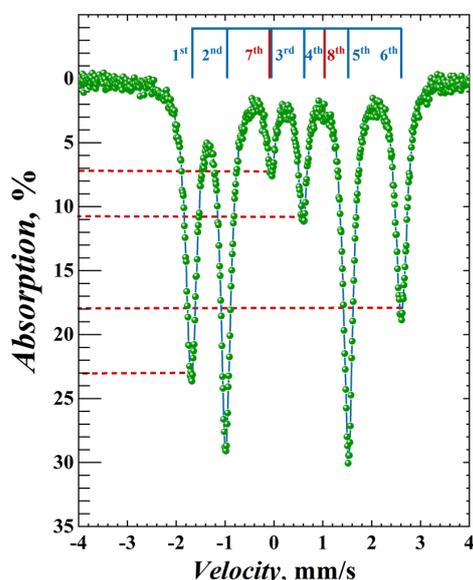


Рис 1. Мёссбауэровский спектр монокристалла FeVO_3 , полученный при $T = 345$ К. Точки – экспериментальные данные, линии – аппроксимация. Положения линий и их асимметрия показаны вертикальными штрихами и пунктирными линиями, соответственно.

ментальных результатов, и И.С. Любутину (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН) за руководство и значительную помощь в проведении работы.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ, проект № 19-29-12016-мк.

Литература

1. Yagupov S. et al. Development of a Synthesis Technique and Characterization of High-Quality Iron Borate FeBO_3 Single Crystals for Applications in Synchrotron Technologies of a New Generation // *Crystal Growth & Design*. 2018. Т. 18. №. 12. С. 7435-7440.
2. Lyubutin, I. S. et. al. Magnetic and electric hyperfine parameters of antiferromagnet FeBO_3 intended for monochromatization of synchrotron radiation // *Journal of Alloys and Compounds*. 2022. С. 164348.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ СТАБИЛЬНОСТИ И ОКИСЛИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ В МНОГОСЛОЙНЫХ РЕНТГЕНОВСКИХ ЗЕРКАЛАХ НА ОСНОВЕ МО/ВЕ.

Соломонов А.В., Каратаев А.В., Гайсин А.У., Филатова Е.О.

*Санкт-Петербургский государственный университет, ул. Ульяновская, д.1,
Петродворец, Санкт-Петербург, Россия
E-mail: asolomonov78@gmail.com*

Многослойные рентгеновские зеркала на основе молибдена и бериллия являются перспективными оптическими элементами для космического и литографического приложений. В данных областях чрезвычайно важна устойчивость оптических параметров к процессам нагрева, т.к. используемые зеркала подвергаются воздействию высоких температур и сильному потоку излучения. В наших предыдущих работах изучалось воздействие отжига на структуру многослойных рентгеновских зеркал на основе Мо и Ве. Было показано, что многослойная система $\text{Si}/[\text{Mo}/\text{Ve}]_{110}$ остается термически стабильной до $200\text{ }^\circ\text{C}$ [1]. При повышении температуры начинается активное перемешивание слоёв бериллия и молибдена, вследствие чего, происходит рост составляющих MoVe_{12} и MoVe_2 на границах раздела. При температурах отжига выше $300\text{ }^\circ\text{C}$ содержание MoVe_2 резко возрастает и составляет 90% при $500\text{ }^\circ\text{C}$.

Введение на межфазную границу системы $\text{Si}/[\text{Mo}/\text{Ve}]_{110}$ барьерного слоя V_4C приводит к образованию новых соединений Ve_xV_y и Ve_2C на границе раздела Ве-на-Мо и уменьшению содержания бериллидов на обеих границах раздела. Данная система остается термически стабильной до $300\text{ }^\circ\text{C}$. Важно отметить, что в отличие от системы без барьерного слоя, в системе $\text{Si}/[\text{Mo}/\text{V}_4\text{C}/\text{Ve}]_{110}$ рост составляющей дибериллида молибдена MoVe_2 , образование которой наибольшим образом влияет на оптические свойства зеркала, происходит при температурах выше $300\text{ }^\circ\text{C}$.

Использование кремния в качестве барьерного слоя также препятствует образованию бериллидов на границах раздела, причем полностью предотвращает образование дибериллида молибдена MoVe_2 . При отжиге системы с прослойкой Si в основном наблюдается увеличение бериллидной составляющей MoVe_{12} и незначительное увеличение вклада MoVe_2 при температурах выше $300\text{ }^\circ\text{C}$. Обе, выше рассмотренные системы $\text{Si}/[\text{Mo}/\text{Ve}]_{110}$ с барьерными слоями, остаются термически стабильными до $300\text{ }^\circ\text{C}$, из чего можно сделать вывод, что введение барьерного слоя расширяет область рабочих температур.

Особый интерес представляет изучение обратной системы Ве/Мо. Было установлено формирование оксида VeO_x на межфазной границе, несмотря на то, что слой Ве находится под слоем Мо. Аналогичный эффект наблюдался в системе Ве/W [2]. Окисление бериллия под молибденом представляет собой следующий механизм: i) на

начальной стадии окисления слой Мо окисляется из атмосферы с образованием слоя MoO_3 , толщина которого со временем значительно увеличивается (в том числе и субоксидов под ним); ii) когда оксиды становятся достаточно толстыми и достигают MoBe_2 , образующегося на границе раздела Мо-на-Ве, образуются чистый Мо и BeO_x ; iii) наконец, в соответствии с механизмом Кабрера-Мотта [3], ионы Ве диффундируют через слой BeO_x к границе раздела Мо-на-Ве, что затем приводит к взаимодействию Мо и Ве с образованием MoBe_2 . Этот цикл продолжается до полного окисления слоя Ве или образования толстого BeO_x , препятствующего диффузии ионов Ве. Анализ Ве 1s спектров Ве/Мо структуры указывает на непрерывное окисление слоя бериллия с течением времени и ростом температуры отжига (его почти полное окисление при 300°C). Введение барьерного слоя Si между слоями молибдена и бериллия практически не препятствует процессу окисления слоя бериллия в системе: предотвращает окисление, только на ограниченный промежуток времени (до 3 месяцев после синтеза). Отжиг сильно окисленной системы (8 месяцев после синтеза) $\text{Si}/[\text{Be}/\text{W}_4\text{C}/\text{Mo}]_{110}$ не приводит к восстановлению структуры, а, наоборот, усиливает процесс окисления.

Все исследования были проведены на комплексном фотоэлектронном и растровом оже-электронном спектрометре Thermo Fisher Scientific Escalab 250xi в Научном парке СПбГУ.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ 19-72-20125.

Литература

1. A. U. Gaisin, A. V. Karataev, A. V. Solomonov, R. S. Pleshkov, N. I. Chkhalo, and E. O. Filatova, "Effect of annealing on the interface formation in Mo/Be multilayer structures without/with a barrier layer," *Phys. Chem. Chem. Phys.*, pp. 23978–23985, 2021, doi: 10.1039/d1cp03819b.
2. S. S. Sakhonenkov and E. O. Filatova, "Interface formation between Be and W layers depending on its thickness and ordering," *Appl. Surf. Sci.*, vol. 534, no. August, p. 147636, 2020, doi: 10.1016/j.apsusc.2020.147636.
3. S. Zalkind, M. Polak, and N. Shamir, "Electron-stimulated oxidation of beryllium by water vapor and by oxygen," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 71, no. 12, pp. 1–7, 2005, doi: 10.1103/PhysRevB.71.125413.

ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ФРУСТРИРОВАННЫХ МАГНЕТИКОВ $\text{TB}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ И $(\text{Y}_{0.95}\text{Er}_{0.05})_2\text{Sn}_2\text{O}_7$

Спиридонова А.В.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт физики,
г. Казань, Россия
sav1998@list.ru

Сегодня интерес к изучению редкоземельных кристаллов со структурой пироксенов очень высок. Оксиды типа $\text{A}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, где в качестве А выступает один из ряда редкоземельных элементов Er^{3+} , Dy^{3+} , Tb^{3+} , Ho^{3+} , Sm^{3+} , Yb^{3+} , Tm^{3+} , принадлежат к классу пироксенов с общей формулой $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$. Они обладают кубической гранцентрированной структурой и принадлежат к пространственной группе $Fd\bar{3}m$. При этом атомы металла образуют трёхмерную сеть тетраэдров с общими углами. Если хотя бы один из атомов А или В является магнитным, а взаимодействие с ближайшими соседями антиферромагнитное, то такие пироксены оказываются сильно фрустрированными. Множество исследований по изучению фрустрированного магнетизма в редкоземельных пироксенах проводилось с помощью измерения магнитной восприимчивости и нейтронной дифракции порошков. Кроме того, для широкого ряда пироксенов на основе Ti^{4+} были выращены монокристаллы [1-2].

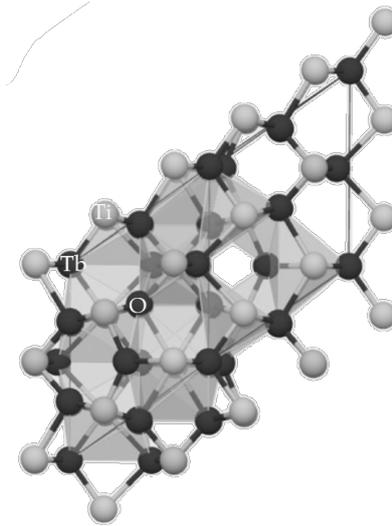


Рисунок 1 – Кристаллическая структура пирохлора $Tb_2Ti_2O_7$.

Основой для описания пирохлоров служат экспериментальные данные. Так, в статье [3] приводятся реальные температурные и полевые зависимости намагниченности и магнитострикции, температурные зависимости теплоёмкости и параметров элементарной ячейки поли- и монокристаллов $Tb_2Ti_2O_7$. При обработке полученных данных исследователи также проводят анализ в рамках теории кристаллического поля.

В общем случае гамильтониан редкоземельного иона A^{3+} в структуре пирохлоров типа $A_2B_2O_7$ имеет вид [4]:

$$H = H_0 + H_{CF} + H_Z + H_{el-def}$$

где H_0 – свободный гамильтониан;

H_Z – оператор взаимодействия $4f$ -электронов с эффективным магнитным полем, включая анизотропный обмен и магнитное дипольное взаимодействие редкоземельных ионов;

H_{el-def} – оператор электрон-деформационного взаимодействия;

$H_{CF} = B_2^0 O_2^0 + B_4^0 O_4^0 + B_4^3 O_4^3 + B_6^0 O_6^0 + B_6^3 O_6^3 + B_6^6 O_6^6$ – гамильтониан иона A^{3+} в кристаллическом поле в декартовой системе координат.

Альтернативным способом получения параметров кристаллического поля является проведение расчётов из первых принципов (*ab initio* расчётов) с использованием теории функционала плотности. Такие симуляции позволяют моделировать поведение $4f$ -электронов в кристаллическом окружении, в том числе, вблизи температуры Кондо. Метод функционала плотности основан на определении свойств структур по значениям плотности [5]. Для монокристалла $Tb_2Ti_2O_7$ было решено провести *ab initio* моделирование температурной зависимости теплоёмкости, параметров кристаллического поля и фононного спектра. В свою очередь, интерпретация фононных спектров позволила установить частоты и типы колебаний решётки. Полученные в результате моделирования данные были сопоставлены с ранее проведёнными расчётами методом теории поля и экспериментальными значениями [6-7]. Все они признаны адекватными и пригодными для дальнейшего использования. Так для более точного определения температурной зависимости теплоёмкости пирохлора $Tb_2Ti_2O_7$ вблизи абсолютного нуля было решено провести пересчёт поточечно на основе полученных спектров фононной плотности.

Кроме того, в процессе работы был впервые осуществлён синтез методом оптической зонной плавки порошка $(Y_{0.95}Er_{0.05})_2Sn_2O_7$. В ходе исследований проведён рентгеноструктурный анализ на дифрактометре Bruker D8 ADVANCE ($\lambda = 1,5406 \text{ \AA}$). Получены зависимости намагниченности порошка $(Y_{0.95}Er_{0.05})_2Sn_2O_7$ на вибрационном магнитометре Physical Properties Measurement System-9 в магнитных полях от 0 до 9 Тл и

температурном диапазоне от 5 К до 300 К. Получен ЭПР-спектр порошка. Проводятся расчёты для пирохлора $(Y_{0.95}Er_{0.05})_2Sn_2O_7$.

Таким образом, в настоящее время активно продолжаются теоретические и экспериментальные исследования соединений $Tb_2Ti_2O_7$ и $(Y_{0.95}Er_{0.05})_2Sn_2O_7$. Следует отметить, что рост монокристаллов пирохлоров затруднён в связи с требованиями ко внешним условиям синтеза: для получения ряда пирохлоров необходимы высокие температуры и давления.

Литература

1. Lago, J. Magnetic ordering and dynamics in the XY pyrochlore antiferromagnet: a muon-spin relaxation study of $Er_2Ti_2O_7$ and $Er_2Sn_2O_7$ / J. Lago, T. Lancaster, S. J. Blundell, S. T. Bramwell, F. L. Pratt, M. Shirai, C. Baines // J. Phys.: Condens. Matter. 2005, Vol. 17. p. 979-988.
2. Balakrishnan, G. Single crystal growth of rare earth titanate pyrochlores / G. Balakrishnan, O. A. Petrenko, M. R. Lees, D. McK. Paul // J. Phys.: Condens. Matter. 1998, Vol. 10. p. 723-725.
3. Aleksandrov, I.V. Crystal field effects and the nature of the giant magnetostriction in terbium dititanate / I.V. Aleksandrov, B.V. Lidskii, L.G. Mamsurova, M.G. Neigauz, K.S. Pigalskii, K.K. Pukhov, N.G. Trusevich, L.G. Shcherbakova / Zh. Eksp. Teor. Fiz. 1985, Vol. 89. p. 2230-2247.
4. Klekovkina, V.V. Crystal field and magnetoelastic interactions in $Tb_2Ti_2O_7$ / V.V. Klekovkina, B.Z. Malkin // Optics and Spectroscopy. 2014, Vol. 116(6). p. 849-857.
5. Kresse, G. Medea User's Guide / G. Kresse, J. Furthmuller // Phys. Rev. B. 1996, Vol. 54(11169). p. 125-173.
6. Chernyshev, V. A. Lattice dynamics of rare-earth titanates with the structure of pyrochlore $R_2Ti_2O_7$ ($R = Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, \text{ and } Lu$): ab initio calculation / V. A. Chernyshev, V. P. Petrov, A. E. Nikiforov // Fiz. Tv. Tela. 2015, Vol. 57(5). p. 982-987.
7. Xiao, H. Y. Theoretical investigation of structural, energetic and electronic properties of titanate pyrochlores / H. Y. Xiao, L. M. Wang, X. T. Zu, J. Lian, R. C. Ewing // J. Phys.: Condens. Matter. 2007, Vol. 19(346203). p. 1-10.

ВЛИЯНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА И ТОНКОЙ АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ НА ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ХРОМОВЫХ ПОКРЫТИЙ

Суляндзига Д.А., Жариков В.И.

МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия E-mail: suliandziga.d.a.14@physics.msu.ru

Алмазоподобные углеродные покрытия, получаемые методами магнетронного напыления, являются перспективными материалами, способными увеличить работоспособность тяжело нагруженных трибосопряжений, увеличить твердость поверхности, уменьшить ее коэффициент трения и увеличить износостойкость, а также снизить зависимость функциональных характеристик от внешних параметров (температура, влажность и т.д.) [1]. Важную информацию о покрытиях можно получить, анализируя корреляцию между структурно-фазовыми характеристиками (в частности, особенностями тонкой атомной структуры) покрытий и их функциональными свойствами [1, 2].

Рассмотрены упрочняющие покрытия, полученные магнетронным распылением хромовой мишени в атмосфере аргона, ацетилена и воздуха или азота на стальные подложки. Для комплексного исследования образцов применялись микрорентгено-спектральный анализ, рентгендифракционные исследования, спектроскопия комбинационного рассеяния, а также микромеханические и трибологические испытания. В табли-

це 1 представлены химический состав образцов, состав атмосферы напыления, результаты их фазового анализа и параметры тонкой атомной структуры.

Таблица 1.
Состав рабочей атмосферы напыления, химический, фазовый состав и параметры тонкой атомной структуры образцов

Номер образца	Состав атмосферы напыления, об. %	Химический состав, ат. %	Фазовый состав	Размер ОКР D, Å ± 2 Å	Величина микродеформации ε, %
XA-1	15 – C ₂ H ₂ , 85 – N ₂	19.57 – C, 30.37 – N, 3.04 – O, 46.61 – Cr, 0.27 – Fe, 0.12 – Ni	CrN	72	9.2
XA-2	10 – C ₂ H ₂ , 90 – N ₂	8.86 – C, 29.53 – N, 11.45 – O, 49.61 – Cr, 0.39 – Fe, 0.14 – Ni	CrN	66	10.6
XA-3	0 – C ₂ H ₂ , 100 – N ₂	27.58 – N, 22.12 – O, 49.87 – Cr, 0.18 – Fe, 0.22 – Ni	CrN	63	11.8
XB-1	20 – C ₂ H ₂ , 80 – воздух	12.41 – N, 42.49 – O, 44.77 – Cr, 0.15 – Fe, 0.19 – Ni	CrN CrO _{0.87}	78	12.6
XB-2	15 – C ₂ H ₂ , 85 – воздух	16.7 – N, 38.2 – O, 44.67 – Cr, 0.18 – Fe, 0.22 – Ni	CrN CrO _{0.87}	58	16.6
XB-3	10 – C ₂ H ₂ , 90 – воздух	20.32 – N, 33.01 – O, 46.21 – Cr, 0.21 – Fe, 0.23 – Ni	CrN CrO _{0.87}	60	16.2

В образцах типа XA установлена фаза CrN, в образцах типа XB были обнаружены нитридная и оксидная фаза хрома. Установлено, что исследованные покрытия при одинаковом фазовом составе имели разное соотношение долей фаз. Проведенные исследования также показали, что ни в одном из исследованных покрытий не наблюдается карбидная фаза. Обнаруженный методом комбинационного рассеяния углерод распределен по покрытиям в виде небольших кластеров, которые вносят вклад в дифракционную картину в виде диффузного фона.

Для всех покрытий были исследованы зависимости размеров областей когерентного рассеяния (ОКР) и величины микродеформаций (ε) от состава рабочей атмосферы, также была исследована зависимость величины микронапряжений от размера ОКР.

Размеры ОКР и величины микродеформаций были рассчитаны по методу Вильямсона-Холла [3], используя отношения двух порядков отражения (hkl и 2h2k2l). Проведенные расчеты показывают, что с уменьшением доли ацетилена уменьшаются размеры ОКР, но при этом увеличивается величина микродеформаций. Также следует заметить, что при данном методе получения в покрытиях всегда наблюдается текстура, что описывает высокий уровень микронапряжений. Зависимость размеров ОКР от величины микродеформации D(ε) соответствует обратному соотношению Холла-Петча.

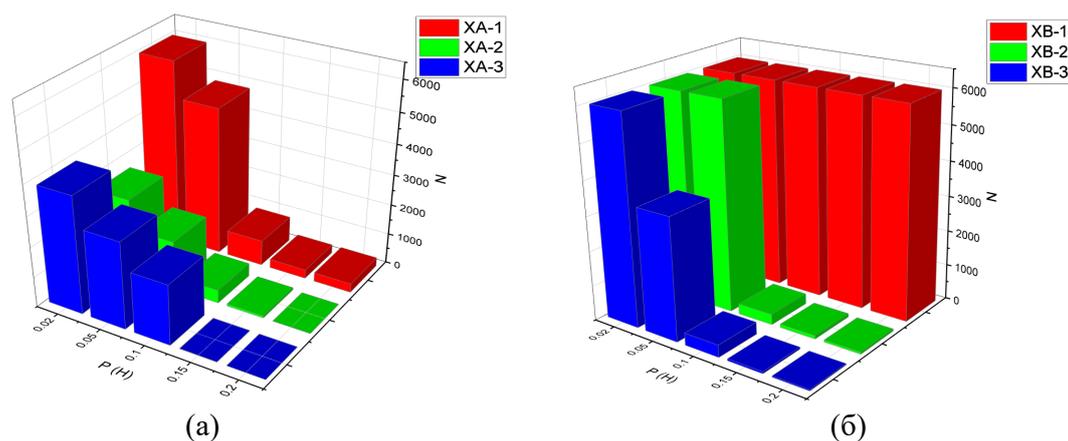


Рис. 1. Зависимость количества циклов до разрушения от прилагаемой нагрузки для образцов типа XA (а) и XB (б).

На рис. 1 представлена зависимость количества циклов работы покрытий от приложенной нагрузки. Видно, что образец XB-1 показал наилучшие характеристики износостойкости. Все покрытия имели коэффициент трения порядка 0.3, что заметно меньше коэффициента трения стали (порядка 0.5-0.6 [4]).

Литература

1. Хрущов М.М. Легированные алмазоподобные покрытия триботехнического назначения // Современные технологии модифицирования поверхностей деталей машин / Под ред. Г.В.Москвитина. - Москва: ЛЕНАНД. 2013. С.78-113.
2. Левин И.С., Хрущов М.М., Марченко Е.А., Авдюхина В.М. Влияние легирования на структуру и особенности трибологического поведения вакуумных алмазоподобных покрытий // Вестник Моск. ун-та. Сер. 3. Физика, астрономия. 2016. № 2. С. 46-52. <http://vnu.phys.msu.ru/abstract/2016/2/16-2-46/>
3. Иверонова В. И., Ревкевич Г. П. Теория рассеяния рентгеновских лучей // М.: Издательство Московского университета — 1972. — 246с
4. Методы и средства испытаний на трение и износ конструкционных и смазочных материалов: Справочник / В.С. Комбалов; под ред. К.В. Фролова, Е.А. Марченко. М.: Машиностроение. 2008. 384с.

МСР-ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫЙ ГРАФЕН ДЛЯ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРИМЕНЕНИЙ

Суханова Е.В., Попов З.И.

Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия

Email: yekaterina.sukhanova@phystech.edu

Растущий глобальный спрос на электроэнергию и необходимость снижения выбросов парниковых газов обуславливает потребность получения экологически чистого топлива, в частности, водородного. Поскольку и солнечный свет, и вода находятся в изобилии, перспективной технологией представляется синтез водорода с помощью реакций фотокаталитического расщепления воды под действием солнечного излучения. Важной задачей является повышение эффективности данного процесса, в связи с чем представляется актуальным поиск новых синтетических материалов, которые возможно использовать в качестве катализаторов для реакции расщепления воды. Для решения поставленной проблемы особенно перспективными кажутся наноматериалы.

Двумерные наноматериалы привлекают к себе особый интерес исследователей из-за уникальных свойств и множества возможных применений. Наиболее известным

представителем является графен [1], экспериментальное получение которого в 2004 году привело к повсеместному исследованию наноматериалов различного состава. Для расширения областей возможного применения графена необходимо разработать методы и подходы, позволяющие контролируемо изменять его свойства согласно заданным целям. Управлять свойствами графена можно, например, искусственно создавая стабильные дефекты в структуре материала [2], применяя молекулярную функционализацию [3] или комбинируя данные подходы. Известно, что на поверхности графена могут образовываться различные дефекты, многие из которых приводят к появлению пятичленных углеродных колец в структуре наноматериала, например, вакансии, дивакансии, дефекты Стоуна-Уэйлса. Интересной задачей представляется изучение влияния функционализации дефектной поверхности графена производными металлоценов – МСр, состоящими из радикала циклопентадиенила и атома металла.

Известно, что молекулы металлоценов характеризуются высокой стабильностью, а также интересными физико-химическими свойствами. В частности, молекулы ферроцена могут использоваться в нефтяной промышленности в качестве антидетонатора, а также находят применение в качестве сенсоров, в качестве добавок к новым материалам, в фармацевтике. Особенно следует отметить тот факт, что данные молекулы находят возможное применение в качестве катализаторов для синтеза углеродных наноструктур, например, углеродных нанотрубок или графеновых нанолент [4], а значит можно предположить возможность функционализации углеродных аллотропов фрагментами молекул металлоценов. Монослой графена, функционализированный фрагментами молекул металлоценов, кажется перспективным для применения в качестве катализатора в фотокаталитических реакциях расщепления воды, так как такой наноматериал содержит в своей структуре атом металла, который способен изменять свою степень окисления под воздействием солнечного света. Таким образом, актуальной представляется задача изучения влияния функционализации поверхности графена производными металлоценов – МСр, состоящими из радикала циклопентадиенила (Ср) и атома металла (М), на свойства монослоя графена, а также изучение уникальных эффектов, возникающих в подобных системах.

В представленной работе было проведено теоретическое исследование влияния функционализации поверхностей чистого и дефектного графена металлоценоподобными структурами, содержащими различные атомы переходных металлов ($M = Fe, Co, Cr, Ni, V$), на физико-химические свойства углеродного монослоя. Квантово-механические расчеты были выполнены с помощью метода функционала электронной плотности (DFT) [5,6], реализованного в программном пакете VASP.

Анализ электронных зонных структур показал, что наличие МСр фрагмента в структуре дефектного графена приводит к появлению дополнительных уровней энергии. Исследование оптических свойств показало, что рассмотренные в работе структуры демонстрируют увеличение интенсивности спектров экстинкции в области длин волн выше 150 нм по сравнению с бездефектным графеном, что указывает на возможность данных структур абсорбировать излучение в видимом диапазоне света, а значит рассмотренные материалы являются многообещающими для фотокаталитических применений. Для исследования возможности использования рассмотренных дефектных структур графена, функционализированных фрагментами молекул металлоценов, в качестве катализаторов в реакции образования активных форм кислорода (реакциях Фентона) были рассчитаны энергии связи промежуточных соединений и построены координаты реакций, что позволило выявить ряд перспективных структур.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ № 21-73-20183.

Литература

1. Novoselov K.S. Nobel lecture: Graphene: Materials in the flatland // *Reviews of Modern Physics*. APS, 2011. Vol. 83, № 3. P. 837–849.

2. Dyck O. et al. Doping transition-metal atoms in graphene for atomic-scale tailoring of electronic, magnetic, and quantum topological properties // Carbon. Elsevier, 2021. Vol. 173. P. 205–214.
3. Mao H.Y. et al. Manipulating the electronic and chemical properties of graphene via molecular functionalization // Progress in Surface Science. Elsevier, 2013. Vol. 88, № 2. P. 132–159.
4. Cherkasov N. et al. Template synthesis and characterization of carbon nanomaterials from ferrocene crystals // Applied surface science. Elsevier, 2014. Vol. 308. P. 388–395.
5. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // Physical Review. 1964. Vol. 136, № 3B. P. B864–B871.
6. Kohn W., Sham L.J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // Phys. Rev. 1965. Vol. 140, № 4A. P. A1133–A1138.

ИЗУЧЕНИЕ НАНОБИОГИБРИДНОГО МАТЕРИАЛА «КЛЕТКИ ФИБРОБЛАСТЫ МЫШИ – НАНОЧАСТИЦЫ КРЕМНИЯ» СИНХРОТРОННЫМИ МЕТОДАМИ ДЛЯ БИМЕДИЦИНСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ

Титова С.С.¹, Цурикова У.А.², Паринова Е.В.¹

¹*Воронежский государственный университет, физический факультет,
Воронеж, Россия*

²*МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия
E-mail: titova@phys.vsu.ru*

Совмещение наночастиц кремния с клеточными культурами, как частный случай получения биогибридных систем вызывает большой исследовательский интерес в научном сообществе. Высокоточная диагностика таких материалов и структур является краеугольным камнем для их эффективного применения, в том числе в тераностике и биомедицине. Синхротронный метод XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) позволяет получать информацию о физико-химическом состоянии, составе, структуре, атомном и электронном строении не только наноразмерных объектов, но и биогибридных наноструктур, для которых характерна чрезвычайно развитая поверхность. Изменения в физико-химическом состоянии поверхности, во многом определяющей свойства наночастиц кремния при интеграции с биологической структурой, крайне актуальны для изучения.

В качестве интегрируемого в биологические объекты материала использовалась суспензия наночастиц кремния. Пленки пористого кремния (основной компонент суспензии) были получены методом электрохимического травления пластины кристаллического кремния c-Si (100) в течение часа в HF:C₂H₅OH=1:1 (плотность тока 50 mA/cm²). В последствие, для получения суспензии, пленки пористого кремния подвергались измельчению в планетарной мельнице Fritsch Pulverisette 7 в течение 50 минут. Органической частью биогибридной структуры для данной работы стали клеточные культуры ЗТЗ НИИ (фибробласты мыши), выращенные на поверхности золота в течение трёх суток. В результате интеграции наночастиц кремния в клетки ЗТЗ НИИ был получен биогибридный образец, время инкубации наночастиц кремния - 72 часа.

Для получения спектров XANES (возбуждения основного L_{2,3} уровня атомов кремния или K уровня атомов кислорода) используется высокоинтенсивное излучение синхротронных источников класса "мегасайенс", что позволяет варьировать энергию квантов рентгеновского излучения без потерь в интенсивности. В нашем случае использовалось излучение станции НАНОФЭС синхротрона НИЦ "Курчатовский институт".

Результаты проведенных впервые экспериментальных синхротронных исследований электронного строения и состава биогибридной структуры «фибробласты мыши - наночастицы кремния» методом спектроскопии XANES совместно с данными растро-

вой электронной микроскопии позволяют сделать вывод о том, что наночастицы совмещенные с биологическими объектами подвержены изменению состава, структуры и физико-химического состояния поверхности.

Исследование выполнено в рамках проекта РНФ 19-72-20180. Методическая проработка синхротронных исследований выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования России в рамках соглашения N 075-15-2021-1351.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И МАГНЕТИЗМА МАЛОСЛОЙНЫХ КЛАСТЕРОВ НАНОГРАФЕНА В УГЛЕРОДНЫХ МИКРО- И НАНО-СФЕРАХ ДОПИРОВАННЫХ АЗОТОМ

Толчина Д.Б.,¹ Авакян Л.А.¹, Манукян А.С.², Козаков А.Т.³ Чумаков Р.Г.⁴,
Емельянов А.В.⁴, Сысякян Н.², Гюласарян А.², Бугаев Л. А.¹

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

²Институт физических исследований Национальной Академии Наук Армении, Аштарак, Армения

³Южный федеральный университет, НИИ физики, Ростов-на-Дону, Россия

⁴Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва Россия

E-mail: Shemetdabo@mail.ru

Методом твердофазного пиролиза органических соединений были синтезированы углеродные микро- и нано-сферы, состоящие из малослойных кластеров нанографена и аморфного углерода с различными концентрациями атомов азота: 0 – 35 ат. %, обладающих ферромагнитными свойствами при комнатной температуре. Прекурсорами синтезированных углеродных микросфер служили порошки безметалльного фталоцианина, фталонитрила и полиэтилена. Для изменения концентрации центров, содержащих азот после замещения углерода в решетке графена, а также изменения концентрации краевых углеродных состояний в нанографенах, менялись условия пиролиза: температура варьировались в пределах 600-700 °С, время 5-100 мин, давление 0.01-15 бар. Для всех синтезированных образцов измерены зависимости намагниченности и магнитного момента от величины магнитного поля в широких диапазонах изменения поля (0.1– 60 кОе) и температур (5 - 300 К). В образцах обнаружен ферромагнетизм на фоне диамагнетизма и парамагнетизма. Так, образец полученный на основе фталоцианина при температуре 700 °С показал сильный парамагнетизм с концентрацией парамагнитных центров $\sim 5 \times 10^{19} \text{ spin g}^{-1}$ и температурно-независимую диамагнитную восприимчивость $\chi^{\text{Dia}} = -1 \times 10^{-6} \text{ emu g}^{-1} \text{ Oe}^{-1}$. При комнатной температуре парамагнитная доля мала, и в основном видна диамагнитная доля, причем ферромагнетизм увеличивается с увеличением давления. Методами магнитометрии, электронного парамагнитного (ЭПР) и ферромагнитного резонанса получены температурные зависимости магнитных характеристик (M_s , M_r , H_c) и магнитно-резонансных характеристик (ΔH , g-фактор) синтезированных материалов в широком диапазоне температур (5–300 К) и магнитных полей (до 60 кОе). Измерены $C1s$, $N1s$, $O1s$ рентгеновские фотоэлектронные спектры XPS, с помощью которых изучена природа парамагнитных центров в образцах и определены элементный состав образцов и отношение sp^2/sp^3 связей в них с использованием СКЛЛ оже-электронных спектров. Последнее показало практически повсеместное превышение доли sp^3 связей по сравнению с sp^2 , что указывает на высокую разупорядоченность и низкую степень графитизации в образцах. Установлено, что в исследуемых образцах ферромагнетизм возникает в результате сосуществования двух механизмов, связанных как с наличием ионов N, так и с наличием различным образом гибридизированных

атомов углерода. С использованием межатомного потенциала взаимодействия ReaxFF метода Молекулярной динамики предложен ряд моделей атомного строения ближнего окружения углерода и азота в образцах. Предложенные модели проверялись путем сопоставления рассчитанных на их основе спектров рентгеновского поглощения в около-порговой области (XANES) с измеренными C- и N-XANES спектрами. Расчеты показали, что первые краевые особенности, расположенные в пределах до ~ 5 эВ над краем поглощения в экспериментальных C- и N-XANES спектрах, крайне чувствительны к типу модели ближнего окружения углерода и азота в образцах. В частности, установлено, что в C-XANES спектре первый пик проявляется только при наличии sp^2 атомов углерода, а второй наблюдается как при внедрении атомов азота, так и для краевых атомов углерода. Причем, наиболее близки к экспериментальным спектрам оказываются пиридиновые конфигурации азота.

ВЛИЯНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОПИРОВАНИЯ НА ПЕРЕНОС ЗАРЯДА И ЭЛЕКТРОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ ДВУМЕРНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Федоренко Р.С.

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

E-mail: roman96233@yandex.ru

В последние годы успешно развивается новая отрасль науки и технологий – органическая электроника. Использование органических соединений удешевляет и упрощает технологический процесс производства электронных устройств за счёт возможности реализации растворных, печатных, аддитивных методов. Устройства органической электроники могут быть гибкими, прозрачными, легкими, что делает эту область перспективной в сфере здравоохранения, информационной безопасности и Интернета.

Недавний прогресс в области органических полевых транзисторов (ОПТ) на основе двумерных монокристаллов [1] стимулирует интерес к двумерным органическим светоизлучающим транзисторам (ОСТ). Небольшие молекулы на основе конденсированного ядра ВТВТ демонстрируют высокую подвижность носителей заряда в ОПТ [2], однако они имеют слабые люминесцентные свойства. Добавление соответствующей молекулярной примеси, действующей как люминофор, может быть способом улучшить люминесцентные свойства и сохранить эффективный перенос заряда в материале для ОСТ.

В данной работе мы используем молекулы на основе ВТВТ (2,7-бис(4-децилфенил)[1]бензотиено[3,2-b][1]бензотиофен) (Dec-P)₂-ВТВТ. Пленки 2D (Dec-P)₂-ВТВТ с латеральными размерами в диапазоне 300–600 мкм были выращены на кремниевых подложках. При добавлении 1% допанта с тетрациеноаценовым (ТТА) ядром, 4-гексилфенил (Hex-P)₂-ТТА, латеральные размеры пленок увеличивались до 2–3 мм (рис. 1, а). На рис. 1b показано изображение типичного ОПТ, изготовленного на кремниевой подложке, а его передаточная характеристика показана на рис. 1с. Дырочная подвижность в монослойных ОПТ на основе исходного и легированного (Dec-P)₂-ВТВТ в линейном режиме находилась в пределах 0,6–0,8 и 0,1–0,2 см²/Вс соответственно. Используя чистые и допированные 2D-пленки (Dec-P)₂-ВТВТ в качестве активных слоев, были изготовлены ОСТ с золотыми электродами. Для допированных устройств мы зафиксировали электролюминесценцию, которая не наблюдалась для чистого (Dec-P)₂-ВТВТ. В результате мы обнаружили, что добавление примеси улучшает рост 2D-пленок и электролюминесцентные свойства, но умеренно снижает подвижность носителей заряда.

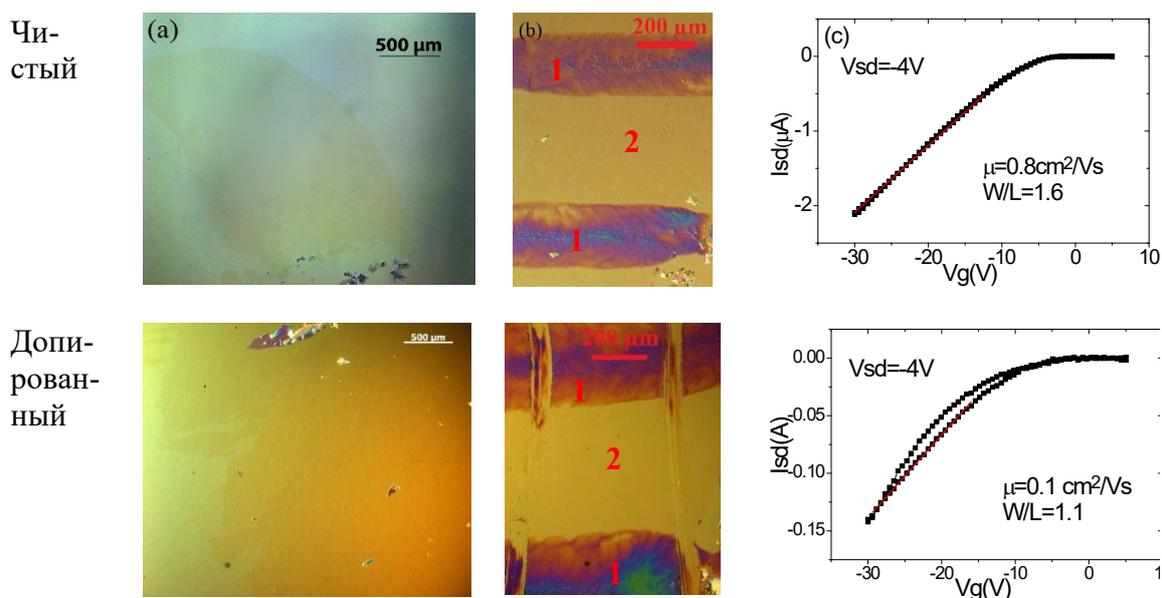


Рис. 1. Оптическое изображение монослоя (Dec-P)2-ВТВТ (подчеркнуто красной линией) (а); Оптическое изображение ОПТ, показывающее контакты истока и стока (1), состоящие из PEDOT:PSS; пленка (Dec-P)2-ВТВТ (2); Передаточные характеристики ОПТ в линейном режиме (с).

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 18-12-00499) и Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

Литература

1. Bruevich V., et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces* 11, 2019, 6315–6324.
2. Minemawari H., et al., *Nature* 475, 2011, 364–367.

ЭФФЕКТ ХОЛЛА В $\text{Lu}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$

Харьков А.М.*, Ситников М.Н., Гельгорн А.В., Рунов Р.В.

*Сибирский государственный университет науки и технологий имени
М.Ф. Решетнева,*

Институт космической техники, Красноярск, Россия

**e-mail: khark.anton@mail.ru*

Исследование магнитотранспортных эффектов представляет фундаментальную задачу с возможным применением в спинтронике. В результате исследования эффекта Холла обнаружена смена типа проводимости от р- к n- типу. Соединения на основе лютеций марганцевых сульфидов имеют практическую значимость в разработке новых материалов для спинтроники [1].

Цель исследования установить константу Холла (R_H) и подвижность μ при замещении катионов марганца ионами лютеция (Lu).

Холловское напряжение измерялось при фиксированных температурах с усреднением по 100 точкам в магнитное поле 12 кЭ, направленном перпендикулярно току с изменением полярности магнитного поля. Константа Холла (R_H) для $\text{Lu}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ приведена на рис. 1а для двух концентраций $x = 0.05$ и $x = 0.2$. Константа Холла, концентрация $n = 1/qR_H$ и подвижность $\mu = R_H/R$ позволяют из температурной зависимости определить тип носителей тока и дать качественную оценку механизма рассеяния носителей тока.

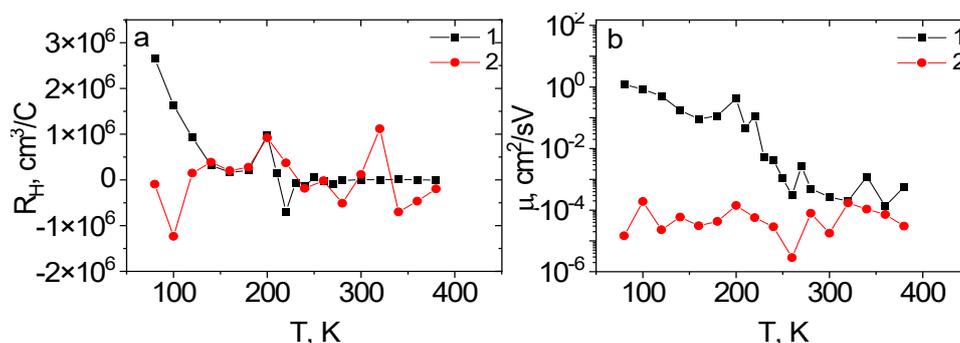


Рис. 1. Температурная зависимость константы Холла R_H (a) и подвижности μ (b) для $\text{Lu}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ с $x = 0.05$ (1) и для $x = 0.2$ (2).

В $\text{Lu}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ с $x = 0.05$ и $x = 0.2$ носителями тока являются дырки и электроны. При замещении марганца ионами лютетия меняется р- тип на n- тип проводимости для концентрации $x = 0.2$. Константа Холла (R_H) меняет знак при нагревании в интервале 100–120 К с отрицательного на положительный при $x = 0.2$. На доменных границах Lu-Mn реализуется ФМ упорядочение и спин-поляронная подзона расщепляется по спину, что приводит к росту эффективной массы и уменьшению подвижности ниже температуры Нееля. Концентрация носителей тока достигает максимума, а подвижность носителей тока минимума (рис. 1b). Ниже температуры локализации электронов T_{loc} подвижность качественно описывается функцией: $\mu = A \cdot \exp(\Delta E/kT)$, $T < T_{loc}$, $x < x_c$ с энергией активации $\Delta E = 0.42$ эВ [2].

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ № МК-620.2021.1.2.

Литература

1. Electrical resistance and impedance of manganese sulfides, substituted by lutetium / A.M. Kharkov, M.N. Sitnikov, O.B. Begisheva, A.V. Gelgorn, O.S. Nikitinskiy, N.A. Chernykh // IOP Conference Series 2021. V. 1181. P. 012006.
2. Magnetoresistance and Electric Polarization in the $\text{Lu}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ Compound / S.S. Aplestin, M.N. Sitnikov, A.M. Kharkov, O.B. Begisheva, F.V. Zelenov // Physica Status Solidi B 2022. V. 259. P. 2100555.

СТРУКТУРА КАРБИНОПОДОБНЫХ ПЛЕНОК И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В КАЧЕСТВЕ РЕЗИСТИВНЫХ ГАЗОВЫХ СЕНСОРОВ

Шилов М.С., Стрелецкий О.А., Нищак О.Ю., Завидовский И.А.

МГУ им. М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физической электроники, Москва, Россия
E-mail: shilov.ms18@physics.msu.ru

Газовые сенсоры представляют большой интерес благодаря возможности их применения в различных областях науки и техники, таких, как: исследование космоса, безопасность окружающей среды, биомедицина, контроль взрывоопасных и токсичных газов на производствах и в быту [1]. Необходимыми требованиями к газовым сенсорам является высокая чувствительность, селективность, высокая скорость отклика, стабильность и возможность работать в широком температурном диапазоне. Обычно сенсоры изготавливают на основе различных полимеров, оксидов полупроводников, пористых структур (например, кремний) [2,3]. Важным параметром таких структур является эффективная площадь поверхности, на которой могут адсорбироваться или десорбироваться молекулы газа.

Наиболее перспективными материалами для сенсорики являются углеродные наноструктуры, такие, как углеродные нанотрубки, графен, нанонити, наночастицы. [4-6].

Также многообещающими являются структуры на основе sp^1 -гибридизованного углерода - карбиноподобные материалы [7]. Такие структуры сформированы из углеродных цепочек, которые могут быть в разупорядоченном так и в ориентированном состоянии. В sp^1 -углероде могут присутствовать как концевые группы, так и дефекты — сшивки между отдельными фрагментами цепочек.

В данной работе тонкие карбиноподобные пленки (до 500 нм) изготавливались в два этапа. На первом этапе осуществлялось растворение исходного материала порошка из ПВДХ в N,N-диметилформамиде. После растворения и высушивания на воздухе получалась тонкая прозрачная пленка ПВДХ. На втором этапе проводилась реакция дегидрогалогенирования полученных пленок. После проведения химической реакции готовые пленки помещались на подложки из кремния и покровного стекла.

Полученные образцы исследовались методами комбинационного рассеяния света, инфракрасной спектроскопии, просвечивающей электронной микроскопии и электронной дифракции. С целью исследования резистивного сенсорного отклика на поверхность пленок, методом магнетронного осаждения осуществлялось напыление металлических серебряных контактов. В дальнейшем к данным контактам (катоду и аноду) подсоединяли измерительные приборы, после чего образцы помещались в замкнутый объем с возможностью подачи паров различных материалов. Сенсорные свойства образцов определялись путем измерения электросопротивления в атмосфере насыщенной парами гидрата аммиака, этанола и воды.

Исследования фазового состава полученных пленок показывают наличие цепочек на основе sp^1 -гибридизованного углерода. При этом, по данным просвечивающей электронной микроскопии (см. рис.1(А)), текстура пленок является высокопористой пенообразной со средним размером пор ~ 30 нм. По данным дифракционного анализа, углеродные цепочки в материале пленки сильно разупорядочены.

Исследование сенсорного отклика от паров водного аммиака представлено на рис.1(Б). Данные по исследованию сенсорного отклика позволяют сделать заключение, что данные структуры на основе аморфного sp^1 -гибридизованного углерода могут служить высокоэффективными газовыми сенсорами.

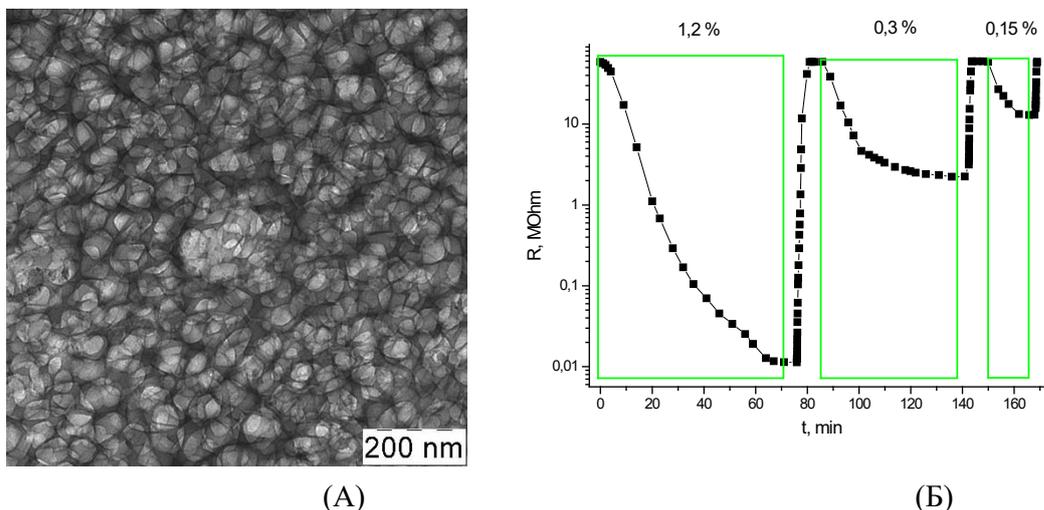


Рис.1. Просвечивающая электронная микроскопия исследуемых покрытий (А) и сенсорный отклик при различном содержании в атмосфере гидрата аммиака (Б)

Литература

1. Li, J. Carbon Nanotubes: Science and Applications. Boca Raton, Fla, USA. CRC Press. 2005.
2. Rittersma, Z.M. Recent achievements in miniaturised humidity sensors—a review of transduction techniques // Sensors and Actuators A: Physical. 2002. Vol. 96, № 2-3, p. 196–210.

3. Traversa, E. Ceramic sensors for humidity detection: the state-of-the-art and future developments // *Sensors and Actuators B: Chemical*. 1995. Vol. 23, № 2-3, p. 135–156.
4. Liobet, E. Gas sensors using carbon nanomaterials: A review // *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2013. Vol. 179. p. 32–45.
5. Basu, S., Bhattacharyya, P. Recent developments on graphene and graphene oxide based solid state gas sensors // *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2012. Vol. 173. p. 1–21.
6. Zhang, M., Su, H.C., Rheem, Y., Hangarter, C.M., Myung, N.V. A Rapid Room-Temperature NO₂ Sensor Based on Tellurium–SWNT Hybrid Nanostructures // *The Journal of Physical Chemistry C*. 2012. Vol. 116, № 37, p. 20067–20074.
7. Salman, Z., Nair A., Tung S. One-dimensional carbon chains as electrical sensors for single-stranded DNA // 2017 IEEE 12th International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems (NEMS). 2017. p. 677–681.

ГИДРОФОБНЫЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ КРЕМНИЙОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, НАНЕСЕННЫЕ НА ВОЛОКНА ХЛОПКА ИЗ СВЕРХКРИТИЧЕСКОГО ДИОКСИДА УГЛЕРОДА

Шуневич В.А.

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

E-mail: valentinashunevich@yandex.ru

Данная работа направлена на исследование растворимости кремнийорганических полимеров и олигомеров и методов их нанесения на текстильный материал из растворов в сверхкритическом диоксиде углерода. Гидрофобные покрытия несут в себе огромный потенциал для развития многих отраслей, например медицины, авиации, а также позволяет решить проблему коррозии металлов и сплавов [1]. Одно из основных применений - создание покрытия на тканях, которое обеспечивает ей гидрофобность и незагрязняемость, что важно при создании рабочей одежды [2]. Также исследуются параметры растворимости используемых гидрофобных агентов в сверхкритической среде.

В настоящий момент основной метод гидрофобизации ткани в текстильной промышленности так или иначе включает в себя использование жидкого растворителя. Этот метод, являясь довольно простым, однако, содержит в себе ряд минусов. Основной недостаток — неравномерность нанесения вещества на подложку. В процессе сушки, который необходим для удаления растворителя с поверхности ткани, на границе раздела воздушной и жидкой фазы возникают капиллярные эффекты, что приводит к неконтролируемой деформации гидрофобизирующего покрытия [1]. Это сильно снижает качество получаемой ткани. Также можно выделить высокие энергозатраты при сушке материала и большое количество вредных для экологии отходов производства.

Эти недостатки могут быть устранены, если в качестве растворителя использовать сверхкритический диоксид углерода. Диоксид углерода в сверхкритическом состоянии имеет ряд преимуществ перед другими веществами, а именно негорючесть, нетоксичность, относительная инертность в химических процессах, а также легко достижимые параметры перехода в сверхкритическое состояние ($T = 31.1^\circ\text{C}$, $p = 7.38 \text{ МПа}$) [3]. Но самое главное, его использование позволяет сделать покрытие равномерным, так как при его удалении происходит переход сразу в газообразное состояние, минуя жидкую фазу, что позволяет избежать возникновения капиллярных эффектов. На данный момент известно, что фторорганические соединения хорошо растворяются в сверхкритическом диоксиде углерода, а также могут быть использованы в качестве гидрофобных агентов [4]. Однако использование фторированных агентов в промышленности нецелесообразно, так как они являются довольно дорогими, а также негативным образом влияют на окружающую среду [5].

В эксперименте была исследована растворимость полиметилгидросилоксанов различной молекулярной массы и произведено их осаждение на хлопковую ткань из сверхкритического диоксида углерода, выступающего в роли растворителя, в присутствии катализатора. Подготовленные образцы различаются между собой массовой долей осажденного полимера и количеством катализатора, используемого при осаждении, что позволяет делать выводы об их влиянии на гидрофобность получаемого покрытия.

Для оценки гидрофобных свойств полученных образцов проводились следующие исследования: измерение динамики краевого угла капли воды с поверхностью, CO₂ спрей-тест, в котором в контакт с водой приходит относительно большая площадь образца, что позволяет оценить равномерность покрытия. Морфология покрытия изучалась методом сканирующей электронной микроскопии. Также сделан анализ химического состава поверхности методом ЭДРС. На основе данных о гидрофобности будет выявлено наилучшее соотношение между катализатором и гидрофобизаторов. Эксперимент позволит определить наилучший гидрофобизатор, а также наиболее удачные для создания гидрофобных тканей условия.

Литература

1. Галиев Э.Е. Хохлов А Р Никитин Л Н, Галлямов М.О. and В М Бузник. Сверхкритический Диоксид Углерода Как Активная Среда Для Химических Процессов С Участьем Фторполимеров. pages 56–65.
2. Akira Nakajima, Kazuhito Hashimoto, and Toshiya Watanabe. Recent Studies on Super-Hydrophobic Films. page 11.
3. Yasuhiko Arai, Takeshi Sako, and Yoshihiro Takebayashi, editors. Supercritical Fluids. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2002.
4. Zonglin Chu and Stefan Seeger. Superamphiphobic surfaces. Chem. Soc. Rev., 43(8):2784–2798, 2014.
5. J. Franzaring, H. Hrenn, C. Schumm, A. Klumpp, and A. Fangmeier. Environmental monitoring of fluoride emissions using precipitation, dust, plant and soil samples. Environmental Pollution, 144(1):158–165, November 2006.

MICROMAGNETIC SIMULATION OF MAGNETIC PROPERTIES OF EXCHANGE-COUPLED Nd₂Fe₁₄B/ α -Fe NANOCOMPOSITES

Semaida A.M.

*National University of Science and Technology "MISiS", Moscow, Russia
E-mail: amasoud2007@yahoo.com*

The hysteresis loops and the magnetic properties of exchange-coupled Nd₂Fe₁₄B/ α -Fe nanocomposites (NCs) permanent magnets, with a different volume fraction of α -Fe (10 - 60 %) and a deviation angle of easy axis from the applied magnetic field direction were discussed using the Micromagnetic finite element method.

The Object-Oriented Micromagnetic Framework (OOMMF) is used as a micromagnetic simulation software to simulate the magnetization reversal process. The simulation model is created by the method of 3D Voronoi [1]. The model contains 58 randomly distributed irregular hard and soft magnetic phase particles. The model size is $300 \times 300 \times 300 \text{ nm}^3$, and a cubic unit cell of $2.5 \times 2.5 \times 2.5 \text{ nm}^3$ was chosen.

The results show that in Nd₂Fe₁₄B/ α -Fe NCs, the energy product and coercivity decrease significantly with the increase of the deviation angle of the easy axis from the direction of the applied magnetic field [2].

As the soft α -Fe phase increases, the coercivity (H_c) decreases monotonically. Saturation magnetization (M_s) and remanence (M_r) increase with the increase of α -Fe. The increment of squareness ratio (M_r/M_s) and the maximum energy product [$(BH)_{max}$] with the increasing of α -

Fe from 10 to 20 vol. % , indicates that the α -Fe is beneficial to the remanence enhancement effect, and then decreases with the continuous increase of α -Fe, which is due to the existence of large-sized soft phase grains [3].

The experimental and simulated magnetic properties agree well with each other, indicating that the accurate selection of the intrinsic parameters of the material and the structure of the adopted model are realistic [4].

The simulation predictions obtained from this work open up new prospects for the fabrication of exchange-coupled permanent magnets. Regarding the future prospects of our work, we point to the importance of simulation studies to reproduce the trends in the experimental hysteresis curves of NCs, which provide reasonable insights into the magnetization dynamics of NCs models [5]. It could serve as a starting point for the development of rare earth-free exchange-coupled NCs with enhanced magnetic energy products for spintronic applications.

References

1. Kim, C.S. Zha, L. Li, M. N. Micromagnetic simulation for optimizing nanocomposite Nd₂Fe₁₄B/ α -Fe permanent magnets by changing grain size and volume fraction // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2021. 523(1): p. 1-10.
2. Fan, J.P. Liang, R. Y. Bai, Y. H. Magnetic properties and magnetic reversal process of exchange-coupled Nd₂Fe₁₄B/ α -Fe₁₆N₂ bilayers // *Journal of Applied Physics*. 2016. 119(23): p. 1-6.
3. Li, Y.Q. Yue, M. Wang, T. Investigation of magnetic properties of MnSi/Co and MnBi/Fe₆₅Co₃₅ nanocomposite permanent magnets by micro-magnetic simulation // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2015. 393: p. 484-489.
4. Aurelio, D. and Vejpravova, J. Understanding magnetization dynamics of a magnetic nanoparticle with a disordered shell using micromagnetic simulations // *Nanomaterials*. 2020. 10(6): p. 1-15.
5. Krupinski, M. Sobieszczyk, P. Zielinski, P. Magnetic reversal in perpendicularly magnetized antidot arrays with intrinsic and extrinsic defects // *Scientific Reports*. 2019. 9(1): p. 1-11.