

2 - Физика конденсированного состояния вещества (включая наносистемы)

Алисултанов Заур Замирович, аспирант 1 года обучения
Москва, Институт общей физики им. А.М. Прохорова, физический
Учет косвенного взаимодействия в теории эпитаксиального графена
Рухадзе Анри Амвросьевич, д.ф.-м.н.
e-mail: zaur0102@gmail.com стр. 96

Алыев Юсиф Имрайыл, ст. преподаватель
Баку, Институт физики НАН Азербайджана, Бакинский институт повышения квалификации и переподготовки педагогических кадров, повышения квалификации
Структурные фазовые переходы в кристаллах твердого раствора Cu₄SeTe
Асадов Юсиф Газанфар, д.ф.-м.н.
e-mail: yusifafshar@box.az стр. 97

Альмухаметова Алия Рафаиловна, магистрант 1 года обучения
Уфа, Башкирский государственный университет, физико-технический институт
Динамика кинков в модели синус-Гордона при наличии локализованной пространственной модуляции параметров системы в виде точечного дефекта
Екомасов Евгений Григорьевич, д.ф.-м.н.
e-mail: AlmukhametovRF@rambler.ru стр. 98

Антипина Любовь Юрьевна, н.с.
Троицк, Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов, отдел структурных исследований
Теоретическое изучение графана с адсорбированными атомами щелочных металлов (Li, Na, K) как перспективного материала для хранения водорода
e-mail: antipinalyu@gmail.com стр. 99

Архипов Александр Владимирович, аспирант 2 года обучения
Махачкала, Дагестанский государственный технический университет, радиотехнический
Исследование зависимости скорости распыления поликристаллических мишеней SiC-AlN от мощности возбуждения разряда
Билалов Билал Аругович, д.ф.-м.н.
e-mail: alexandr_87@pochta.ru стр. 101

Беленкова Татьяна Евгеньевна, 4 курс
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический
Моделирование структуры электронных устройств на основе селективно графитированных графеновых слоев
Чернов Владимир Михайлович, д.ф.-м.н.
e-mail: belenkov@csu.ru стр. 102

Белозеров Александр Сергеевич, аспирант
Екатеринбург, Институт физики металлов УрО РАН, -
"Метод квантового Монте-Карло для обменного кулоновского взаимодействия в рамках схемы LDA+DMFT на примере α -железа"
Анисимов Владимир Ильич, д.ф.-м.н.
e-mail: alexander.s.belozеров@gmail.com стр. 104

Боков Арсений Александрович, лаборант
Екатеринбург, Институт электрофизики УрО РАН, лаборатория прикладной электродинамики
Получение компактов из наноразмерного порошка оксида алюминия методом одноосного магнитно-импульсного прессования с использованием различных концентраторов механического импульса
Ноздрин Андрей Александрович,
e-mail: Bokov.arseniy@gmail.com стр. 105

Бондаревский Александр Александрович, 5 курс
Красноярск, Сибирский федеральный университет, физический
Магнитооптические свойства многослойных пленок Co/TiO₂
Полякова Клавдия Павловна, к.ф.-м.н.
e-mail: aleeb@mail.ru стр. 107

Бугаева Инна Александровна, аспирант
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Влияние гидростатического давления на структуру и электронные свойства кристалла сульфата натрия
Журавлев Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: inkas88@yandex.ru стр. 108

Великоруссов Петр Викторович, аспирант
Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский государственный университет, Физический
Акустические исследования суперионного фазового перехода AgI в порых MCM-41
e-mail: P.Velikorussov@gmail.com стр. 109

Вотинов Иван Сергеевич, 5 курс
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический
Моделирование структуры гибридных углеродных фаз
Беленков Евгений Анатольевич, д.ф.-м.н.
e-mail: belenkov@csu.ru стр. 109

Габдрахманова Лилия Айратовна, аспирант 1 года обучения
Уфа, Башкирский государственный университет, Физико-технический институт
Исследование структурных превращений в пластически деформированном кобальте
Альмухаметов Рафаил Фазыльянович, д.ф.-м.н.
e-mail: la-gabdrahmanova@mail.ru стр. 111

Гаузин Иван Сергеевич, аспирант
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический
Кинетика Оствальдовского созревания в системах с конечной объемной долей частиц второй фазы
Ягафаров Шакир Шавкатович, к.ф.-м.н.
e-mail: gauzinis@mail.ru стр. 112

Гольгин Евгений Александрович, аспирант 3 года обучения
Иркутск, Иркутский государственный университет, физический
Влияние температуры на ΔE--эффект в быстрозакаленных лентах Fe₆₄Co₂₁B₁₅
Гаврилюк Алексей Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: egolygin@arbse.net стр. 113

Гольгин Евгений Александрович, аспирант 3 года обучения
Иркутск, Иркутский государственный университет, физический
Влияние термомангнитной обработки и температуры нагрева на магнитоупругие свойства быстрозакаленной металлической лент состава Fe₆₇Co₁₀Cr₃Si₅B₁₅
Семенов Андрей Леонидович, к.ф.-м.н.
e-mail: egolygin@arbse.net стр. 114

Гоппе Алексей Владимирович, 2 курс
Златоуст, Южно-Уральский государственный университет в г.Златоусте, машиностроительный
Влияние размера частиц, образующихся при диспергировании некоторых чистых металлов, на удельную энергию этого процесса.
Соколова Наталья Марковна, к.ф.-м.н.
e-mail: gav74z@yandex.ru стр. 116

Григорьева Екатерина Александровна, магистрант 2 года обучения
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Термодинамические функции кристаллов ThO₂ со структурой флюорита
Федорова Татьяна Петровна, к.ф.-м.н.
e-mail: Ekkaterinaa@yandex.ru стр. 117

Дадаев Динислам Хайбулаевич, н.с.
Махачкала, Научно-исследовательский институт общей и неорганической химии им. Бергмана, биолого-химический

Особенности контактного плавления в системе свинец-теллур

e-mail: dadaeff@mail.ru стр. 118

Дмитриенко Дарья Викторовна, аспирант
Барнаул, Алтайский государственный технический университет, естественно-научный институт
Исследование самодиффузии и структурных превращений вблизи малоугловых границ зерен кручения в Ni в условиях одноосной деформации

Полетаев Геннадий Михайлович, д.ф.-м.н.
e-mail: gmpoletaev@mail.ru стр. 119

Донцов Сергей Александрович, 5 курс
Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский государственный университет, физический
Температурные зависимости времен релаксации ядер ^{13}C в растворах ионных жидкостей

Чижик Владимир Иванович, д.ф.-м.н.
e-mail: dontsov_sergei@nmr.phys.spbu.ru стр. 120

Дьяченко Алексей Александрович, аспирант
Екатеринбург, Институт физики металлов УрО РАН, отдел электронных свойств
Теоретическое исследование перехода металл-диэлектрик в монооксиде кобальта под давлением

Анисимов Владимир Ильич, д.ф.-м.н.
e-mail: dyachenko@imp.uran.ru стр. 121

Жигачев Андрей Олегович, 4 курс
Тамбов, Тамбовский государственный университет, институт математики, физики и информатики
Компьютерное моделирование поверхностных эффектов в планарном массиве атомов кремния методом эмпирических потенциалов

Умрихин Алексей Викторович, к.ф.-м.н.
e-mail: Andreyzhig2009@yandex.ru стр. 124

Жигачев Андрей Олегович, 4 курс
Тамбов, Тамбовский государственный университет, институт математики, физики и информатики
Определение фазового состава сферических частиц керамических материалов на основе диоксида циркония, стабилизированного оксидом иттрия

Умрихин Алексей Викторович, к.ф.-м.н.
e-mail: Andreyzhig2009@yandex.ru стр. 123

Замулин Иван Сергеевич, 5 курс
Абакан, Хакасский государственный университет, институт естественных наук и математики
Молекулярнодинамическое исследование термодинамических характеристик нанокластеров платины

Гафнер Светлана Леонидовна, д.ф.-м.н.
e-mail: zamulin_ivan@mail.ru стр. 125

Заречина Елена Сергеевна, магистрант 2 года обучения
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Электронная структура и химическая связь в кристалле Ag_2O

Кравченко Наталья Георгиевна, к.ф.-м.н.
e-mail: Elena34056@yandex.ru стр. 127

Зырянов Виктор Юрьевич, магистрант 1 года обучения
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Исследование структурных, электронных и механических свойств Li_2O из первых принципов

Журавлев Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: zvy69@mail.ru стр. 128

Изотова Галина Владимировна, магистрант 1 года обучения
Воронеж, Воронежский государственный педагогический университет, физико-математический
Релаксация модуля сдвига металлического стекла $Zr_{46}(Cu_{4/5}Ag_{1/5})_{46}Al_8$ вблизи температуры стеклования при разных скоростях нагрева
Хоник Виталий Александрович, д.ф.-м.н.
e-mail: galina3028@yandex.ru стр. 130

Киселева Елена Александровна, магистрант 1 года обучения
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Механические свойства хлорида серебра
Журавлев Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: Lenok_matem@mail.ru стр. 131

Кислов Евгений Александрович, аспирант 3 года обучения
Екатеринбург, Институт электрофизики УрО РАН, -
Исследование углеродных автокатодов методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии
Кузнецов Вадим Львович, д.т.н.
e-mail: keaman@yandex.ru стр. 132

Козлов Петр Александрович, аспирант
Красноярск, Сибирский федеральный университет, институт инженерной физики и радиоэлектроники
Полярное представление трехзонной p-d модели с сильным электрон-фононным взаимодействием
Овчинников Сергей Геннадьевич, д.ф.-м.н.
e-mail: maruder4@gmail.com стр. 133

Колпачева Наталия Алексеевна, магистрант 1 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
Исследование фталоцианина никеля методами рентгеновской абсорбционной спектроскопии и функционала плотности
Авакян Леон Александрович, к.ф.-м.н.
e-mail: kolpacheva.natalia@gmail.com стр. 134

Комаровских Андрей Юрьевич, 5 курс
Новосибирск, Новосибирский государственный университет, физический
Исследование методом ЭПР природы и структуры примесных дефектов в алмазах, выращенных в карбонатных средах
Надолинный Владимир Акимович, д.ф.-м.н.
e-mail: komarr@ngs.ru стр. 135

Коньков Виталий Александрович, магистрант 1 года обучения
Красноярск, Сибирский государственный аэрокосмический университет, ИКИВТ
Структура и магнитные свойства β -Fe_{1,6}Ge эпитаксиальных тонких пленок
Мягков Виктор Григорьевич, д.ф.-м.н.
e-mail: vitalkonkovbox@mail.ru стр. 136

Костенко Максим Геннадьевич, м.н.с.
Екатеринбург, Институт химии твердого тела УрО РАН, -
Электронная структура упорядоченного монооксида титана
Ремпель Андрей Андреевич, д.ф.-м.н.
e-mail: makskostenko@yandex.ru стр. 138

Курбангулов Азат Рифкатович, аспирант
Стерлитамак, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, математики и естественных наук
Расчет теплоемкости суперионного проводника AgCuSe
Биккулова Нурия Нагимьяновна, д.ф.-м.н.
e-mail: azatkurbanstr@mail.ru стр. 140

Куренкова Елена Владимировна, 6 курс
Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский государственный университет, физический
Исследование спин-решеточной релаксации ядер ^1H в насыщенных гидридах неупорядоченных бинарных сплавов $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x$
Шеляпина Марина Германовна, к.ф.-м.н.
e-mail: kurenkova_elen@mail.ru стр. 141

Лауров Евгений Петрович, ассистент
Абакан, Хакасский государственный университет, институт естественных наук и математики
Влияние температуры на порог протекания в одномерном магнетике с учетом взаимодействия ближайших соседей
Удодов Владимир Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: layurov@yandex.ru стр. 142

Логвинов Павел Александрович, магистрант 1 года обучения
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Исследование зонной структуры $\beta\text{-SiC}$ из первых принципов
Золотарев Михаил Леонидович, к.ф.-м.н.
e-mail: paul@mail@yandex.ru стр. 143

Мамонтов Александр Иванович, аспирант
Сыктывкар, Сыктывкарский государственный университет, институт точных наук и информационных технологий
Применение рентгеновских методов для анализа многослойных наноструктур
Петраков Анатолий Павлович, д.ф.-м.н.
e-mail: snowchek@mail.ru стр. 144

Мельников Евгений Васильевич, 6 курс
Томск, Национальный исследовательский Томский политехнический университет, институт физики высоких технологий
Изучение механизма деформации и процессов локализации пластического течения
Астафурова Елена Геннадьевна, к.ф.-м.н.
e-mail: melnickow-jenya@yandex.ru стр. 145

Минин Максим Геннадьевич, аспирант
Екатеринбург, Уральский федеральный университет, физико-технологический институт
Термолюминесценция порошков h-BN после УФ-облучения
Вайнштейн Илья Александрович, д.т.н.
e-mail: minin@intertech-corp.ru стр. 147

Мкртчян Левон Спартакович, аспирант
Ставрополь, Ставропольский государственный университет, физико-математический
Диэлектрические свойства тонкого слоя магнитной жидкости с графитовым наполнителем в магнитном поле
Диканский Юрий Иванович, д.ф.-м.н.
e-mail: mkrt-levon@yandex.ru стр. 148

Нестеров Александр Евгеньевич, аспирант 2 года обучения
Красноярск, Сибирский федеральный университет, институт инженерной физики и радиоэлектроники
Автоматизированные исследования температурных зависимостей скоростей упругих волн и затухания звука в монокристаллах $\text{K}^2\text{Pb}(\text{Br})_5$ и $\text{RbPb}(\text{Br})_5$ и керамиках $\text{BaTi}_{1-x}\text{Zr}_x\text{O}_3$
Турчин Павел Петрович, к.ф.-м.н.
e-mail: krsk-nes@mail.ru стр. 150

Новиков Сергей Валерьевич, 3 курс
Санкт-Петербург, Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, отделение физики диэлектриков и полупроводников
Влияние нанокристаллизации на термоэлектрические свойства пленок на основе Cr-Si
Бурков Александр Трофимович, д.ф.-м.н.
e-mail: S.Novikov@mail.ioffe.ru стр. 151

Новоселов Дмитрий Юрьевич, аспирант
Екатеринбург, Институт физики металлов УрО РАН, лаборатория оптики металлов
Спиновый переход в соединении LaCoO₃
Анисимов Владимир Ильич, д.ф.-м.н.
e-mail: novoselov@imp.uran.ru стр. 153

Носаева Татьяна Александровна, аспирант
Волгоград, Волгоградский государственный социально-педагогический университет, математики, информатики и физики
Воздействие ионизации примесей на проводимость графена
Крючков Сергей Викторович, д.ф.-м.н.
e-mail: nosaeva.ta@gmail.com стр. 154

Овсяников Александр Константинович, 5 курс
Калининград, Балтийский федеральный университет имени Канта, физико-технический
Эффекты старения и морфология пористых стёкол, содержащих внедрённые материалы.
Никулин Николай Михайлович, к.ф.-м.н.
e-mail: ovsyanikov_a_k@mail.ru стр. 156

Осетров Евгений Игоревич, 5 курс
Красноярск, Сибирский федеральный университет, институт инженерной физики и радиоэлектроники
Мёссбауэровское исследование микросфер энергетических зол
Баюков Олег Артемьевич, д.ф.-м.н.
e-mail: evgeniy-osetrov@mail.ru стр. 157

Осокина Лилия Витальевна, 4 курс
Красноярск, Сибирский федеральный университет, институт инженерной физики и радиоэлектроники
Изменения структуры при фазовых переходах, критические и некритические параметры порядка в эльпасолите Cs₂RbDyF₆
Мисюль Сергей Валентинович; Молокеев Максим Сергеевич, д.ф.-м.н., к.ф.-м.н.
e-mail: osokina.lily@gmail.com стр. 159

Павлов Сергей Сергеевич, аспирант 3 года обучения
Благовещенск, Амурский государственный университет, инженерно-физический
Энергия активации системы «цеолит - металлические наночастицы»
Астапова Елена Степановна, д.ф.-м.н.
e-mail: pavlovsergeys@gmail.com стр. 160

Пирожкова Татьяна Сергеевна, 4 курс
Тамбов, Тамбовский государственный университет, институт математики, физики и информатики
Исследование механизмов упруго-пластического деформирования материалов при динамическом наноиנדентировании
Тюрин Александр Иванович, к.ф.-м.н.
e-mail: chaxadrachespud@yandex.ru стр. 162

Писарева Татьяна Александровна, магистрант 1 года обучения
Ижевск, Удмуртский государственный университет, физико-энергетический
Електроёмкость нанокompозитных систем активированный уголь - металл
Харанжевский Евгений Викторович, к.т.н.
e-mail: Tanucha5@yandex.ru стр. 164

Плетнев Олег Николаевич, 3 курс
Красноярск, Сибирский федеральный университет, институт инженерной физики и радиоэлектроники
Мёссбауэровское исследование магнитной структуры плёнок Fe/Pd/MgO
Баюков Олег Артемьевич, д.ф.-м.н.
e-mail: print423@gmail.com стр. 165

Полянский Дмитрий Александрович, доцент
Владивосток, Дальневосточный федеральный университет, естественных наук
Статистические и энтропийные характеристики квазикристаллического упорядочения
e-mail: rambo192@mail.ru стр. 167

Прохоренкова Надежда Валерьевна, преподаватель
Усть-Каменогорск, Восточно-Казахстанский технический государственный университет, информационных технологий и энергетики

Особенности структуры и свойств плазменно-детонационных покрытий на основе Ni-Cr и Co-Cr
e-mail: nadin_kaz@mail.ru стр. 168

Рыбина Эльвира Нафизовна, аспирант
Челябинск, Челябинский государственный педагогический университет, физический

Рентгеноструктурный анализ $C_{12}H_{22}O_{11} - NaCl - 2H_2O$

Брызгалов А.Н., д.ф.-м.н.
e-mail: elvirarybina@mail.ru стр. 169

Сабиров Артур Айсхатович, аспирант
Пермь, Пермский государственный национальный исследовательский университет, физический
Применение методов атомно-силовой микроскопии для наблюдения поверхности тонкой пленки магнитной жидкости

Лунегов Игорь Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: baron@xakep.ru стр. 170

Семячков Виктор Анатольевич, магистрант 1 года обучения
Красноярск, Сибирский государственный аэрокосмический университет, ИКИВТ
Влияние твердофазных реакций на свойства тонкопленочных структур Fe/Pd

Жигалов Виктор Степанович, д.ф.-м.н.
e-mail: viktorsa@inbox.ru стр. 171

Сержантова Мария Викторовна, 3 курс
Красноярск, Сибирский федеральный университет, химический
Теоретическое исследование магнитных свойств вакансий в гексагональном нитриде бора

Кузубов Александр Александрович, к.ф.-м.н.
e-mail: sunrise.86@mail.ru стр. 173

Ситников Максим Николаевич, магистрант 2 года обучения
Красноярск, Сибирский государственный аэрокосмический университет, институт космических исследований и высоких технологий

Магнитные свойства соединений оксидов кобальта

Аплеснин Сергей Степанович, д.ф.-м.н.
e-mail: kineru@mail.ru стр. 174

Соловьев Александр Николаевич, 6 курс
Великий Новгород, Новгородский государственный университет, институт электронных и информационных систем

Широкополосный магнитоэлектрический трансформатор

Бичурин Мирза Имамович, д.ф.-м.н.
e-mail: cah.zuljin@gmail.com стр. 176

Соловьев Иван Николаевич, 6 курс
Великий Новгород, Новгородский государственный университет, институт электронных и информационных систем

Магнитоэлектрический сборщик сверхвысокочастотной энергии

Бичурин Мирза Имамович, д.ф.-м.н.
e-mail: ivan.solessi@gmail.com стр. 176

Старинский Сергей Викторович, магистрант 2 года обучения
Новосибирск, Новосибирский государственный университет, физический
Механизмы лазерного испарения серебра в режимах синтеза наноструктур

Булгаков Александр Владимирович, д.ф.-м.н.
e-mail: starikhbz@mail.ru стр. 177

Суворов Андрей Леонидович, 3 курс
Златоуст, Южно-Уральский государственный университет, машиностроительный
Влияние поверхностно-активных веществ разных концентраций на силу абразивного трения, сошлифованную массу и энергию диспергирования никеля.
Соколова Наталья Марковна, к.ф.-м.н.
e-mail: als_2991@mail.ru стр. 179

Трубникова Лилия Валерьевна, 4 курс
Красноярск, Сибирский федеральный университет, институт инженерной физики и радиоэлектроники
Исследование наночастиц 3-d металлов полученных с помощью органического синтеза методом электронно-парамагнитного резонанса
Петраковская Элеонора Анатольевна, к.ф.-м.н.
e-mail: lilia_trub@mail.ru стр. 180

Филиппов Семён Игоревич, магистрант 2 года обучения
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
Электронная структура кристаллов CuBS₂ и CuGaS₂
Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.
e-mail: filippov_sem@kemsu.ru стр. 182

Филиппова Елена Рудольфовна, аспирант 3 года обучения
Йошкар-Ола, Марийский государственный университет, физико-математический
Одностенные нанотрубки (4,3) и (5,3) из атомов золота в модели Хаббарда
Миронов Геннадий Иванович, д.ф.-м.н.
e-mail: 31aisha1986@rambler.ru стр. 183

Халяпкин Михаил Михайлович, аспирант
Абакан, Хакасский государственный университет, институт естественных наук и математики
Влияние многочастичного взаимодействия на образование плотноупакованных политипов в рамках аксиальной модели Изинга
Удодов Владимир Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: makon_19@mail.ru стр. 185

Хамидуллин Айдар Раифович, аспирант
Уфа, Башкирский государственный университет, инженерный
Новые эластичные материалы на основе синдиотактического 1,2-полибутадиена с необычными физико-механическими свойствами
Чувывров Александр Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: aidar_kh_r@mail.ru стр. 186

Харьков Антон Михайлович, аспирант 1 года обучения
Красноярск, Сибирский государственный аэрокосмический университет, институт космической техники
Магнитные свойства твердых растворов Ho_xMn_{1-x}S
Аплеснин Сергей Степанович, д.ф.-м.н.
e-mail: khark.anton@mail.ru стр. 188

Хасанов Вадим Миратович, 6 курс
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический
Исследование гетероструктур AlGa_N/Ga_N методами рентгенодифракционного анализа
Беленков Евгений Анатольевич, д.ф.-м.н.
e-mail: vadim_khasanov@mail.ru стр. 190

Чепкасов Илья Васильевич, аспирант 2 года обучения
Абакан, Хакасский государственный университет, институт естественных наук и математики
Анализ влияния скорости охлаждения и температуры на физические параметры нанокластеров Cu синтезированных из газовой фазы
Гафнер Юрий Яковлевич, д.ф.-м.н.
e-mail: ilya_chepkasov@mail.ru стр. 191

Шабунина Евгения Валерьевна, аспирант
Абакан, Хакасский государственный университет, естественных наук и математики
Зависимость скорости формирования ферромагнитной фазы от параметров модели
Удодов Владимир Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: galichinaev@mail.ru стр. 193

Шепель Дарья Александровна, аспирант
Томск, Институт сильноточной электроники СО РАН, физический
Влияние теплофизических свойств материала матрицы и включений на тепловой режим образцов облучаемых низкоэнергетического сильноточного импульсного электронного пучка
Марков Алексей Борисович, к.ф.-м.н.
e-mail: DAShepel@lve.hcei.tsc.ru стр. 194

Щербанич Максим Сергеевич, 4 курс
Петрозаводск, Петрозаводский государственный университет, физико-технический
Рентгенографические исследования композитов стеклоуглерода с кобальтом
Логинов Дмитрий Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: m.sherbanich@yandex.ru стр. 195

Учет косвенного взаимодействия в теории эпитаксиального графена

Алисултанов Заур Замирович

Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Рухадзе Анри Амвросьевич, д.ф.-м.н.

zaur0102@gmail.com

Гамильтониан для эпитаксиального графена может быть записан так

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + t \sum_{i,j,\sigma} (a_{i\sigma}^+ b_{j\sigma} + h.c.) + t' \sum_{i,j,\sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + b_{i\sigma}^+ b_{j\sigma} + h.c.) + \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} a_{i-\sigma}^+ a_{i-\sigma} + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{ki\sigma} (\exp(-ikr_i) c_{k\sigma}^+ a_{i\sigma} + h.c.) \quad (1)$$

Здесь ε_k - энергия электронов подложки, t - матричный элемент перехода электрона на ближайший соседний атом, t' - матричный элемент перехода на второй соседний атом, U - энергия внутриаомного кулоновского отталкивания, N - число атомов в подложке, $c_{k\sigma}^+$ ($c_{k\sigma}$) - оператор рождения (уничтожения) электрона подложки, находящегося в состоянии $k\sigma$, $k = (\chi, k_z)$ - трехмерный квазиимпульс электронов подложки, $a_{i\sigma}^+$ ($a_{i\sigma}$) - оператор рождения (уничтожения) электрона i -го атома графена, относящегося к подрешетке А, $b_{i\sigma}^+$, $b_{i\sigma}$ - аналогичные операторы для подрешетки В, V - матричный элемент взаимодействия атома углерода с подложкой, r_i - двумерный радиус - вектор i -го атома графена. Отметим, что гамильтониан (1) учитывает косвенное взаимодействие между атомами эпитаксиального графена. Учитывая только переходы на ближайшие соседние атомы (т.к. $t' \ll t$) и пренебрегая внутриаомным кулоновским отталкиванием, а также замечая, что $kr_i = \chi r_i$ выражение (1) можно переписать в виде

$$H = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + t \sum_{i,j,\sigma} (a_{i\sigma}^+ b_{j\sigma} + h.c.) + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{k_z, \chi, i, \sigma} (\exp(-i\chi r_i) c_{k\sigma}^+ a_{i\sigma} + h.c.) \quad (2)$$

Далее введем следующие функции Грина

$$\begin{aligned} G_{kk'}^\sigma(\omega) &= \left\langle \left\langle c_{k\sigma} \left| c_{k'\sigma}^+ \right. \right\rangle \right\rangle_\omega, \\ G_{qq'}^\sigma(\omega) &= \left\langle \left\langle a_{q\sigma} \left| b_{q'\sigma}^+ \right. \right\rangle \right\rangle_\omega = \left\langle \left\langle b_{q\sigma} \left| a_{q'\sigma}^+ \right. \right\rangle \right\rangle_\omega, \\ G_{gs}^\sigma(\omega) &= \left\langle \left\langle a_{\chi\sigma} \left| c_{k'\sigma}^+ \right. \right\rangle \right\rangle_\omega = \left\langle \left\langle b_{\chi\sigma} \left| c_{k'\sigma}^+ \right. \right\rangle \right\rangle_\omega, \\ G_{sg}^\sigma(\omega) &= \left\langle \left\langle c_{q,k_z\sigma} \left| a_{q'\sigma}^+ \right. \right\rangle \right\rangle_\omega = \left\langle \left\langle c_{q,k_z\sigma} \left| b_{q'\sigma}^+ \right. \right\rangle \right\rangle_\omega, \end{aligned} \quad (3)$$

где $G_{kk'}^\sigma(\omega)$ - функция Грина электронов подложки, $G_{qq'}^\sigma(\omega)$ - функция Грина, описывающая переход электронов графена между соседними атомами, $G_{gs}^\sigma(\omega)$ и $G_{sg}^\sigma(\omega)$ описывают переходы электронов из графена в подложку и наоборот. Аппроксимируя подложку, аналогично работам [1,2], следующим образом получим

$$A(q, \omega) = \frac{\Gamma_c}{\left(\omega \mp t f(q) - \lambda \Gamma_c \ln \frac{\omega - \varepsilon(q) + \Lambda}{\omega - \varepsilon(q) - \Lambda} \right)^2 + \Gamma_c^2}.$$

На рис. 1. изображены зависимости приведенных плотностей состояний $\rho_g(\alpha) = \int_0^{q_B} A(q, \alpha) q dq$ от энергетической переменной $\alpha = \omega/\Gamma_c$ при учете и без учета косвенного взаимодействия.

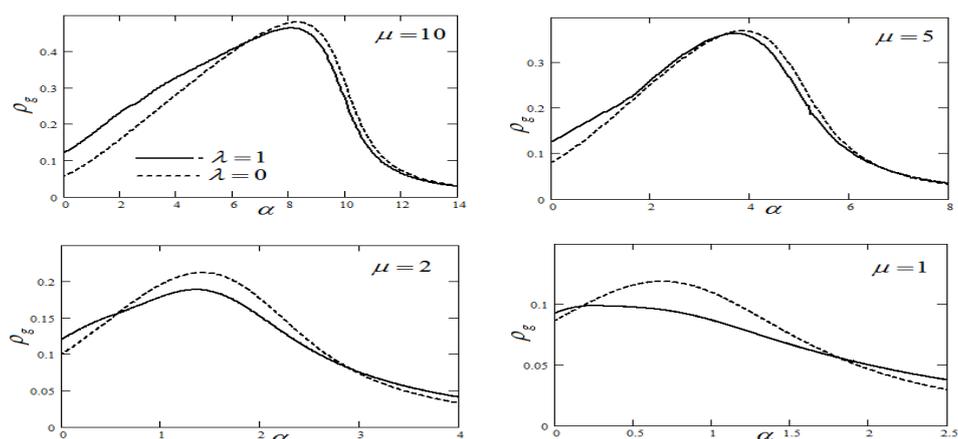


рис.1. Приведенная плотность состояний при различных взаимодействиях графена с подложкой

Пунктирные линии есть, хорошо известные из работ [3,4], плотности состояний эпитаксиального графена без учета косвенного взаимодействия. Из рисунка видно, что учет косвенного взаимодействия (сплошные линии) приводит к отклонению от линейного характера плотности состояний, характерной для изолированного графена. Кроме того, в спектре графена появляется дополнительная щель, связанная с косвенным взаимодействием. Это видно, прежде всего, из того, что разность $\rho_g(0, \lambda = 1) - \rho_g(0, \lambda = 0)$ отлична от нуля.

Список публикаций:

- [1] С.Ю. Давыдов, ФММ 47, 481 (1979)
- [2] С.Ю. Давыдов, ФТП 46, 204 (2012)
- [3] С.Ю. Давыдов, ФТП 45, 629 (2011)
- [4] З.З. Алисултанов, Р.П. Мейланов, ФТТ (в печати)

Структурные фазовые переходы в кристаллах твердого раствора Cu_4SeTe

¹Алыев Юсиф Имрайыл

²Н.А.Гасымова, Г.Г.Гусейнов

¹Бакинский институт повышения квалификации и переподготовки педагогических кадров

²Институт физики НАН Азербайджана

yusifafshar@gmail.com

Известно, что термомагнитные и термоэлектрические материалы с малой решеточной теплопроводностью и высокой подвижностью носителей заряда имеют широкую область применения. К числу таких материалов относятся суперионные халькогениды Ag, Cu и различные твердые растворы на их основе. Очевидно, что для эффективного использования этих материалов необходимо и наличие экспериментальных данных о влиянии внешних факторов на структуру и структурные изменения. Отметим, что для вышеуказанных материалов характерным свойством является наличие полиморфных превращений с увеличением температуры.

В связи с изложенным в настоящей работе приводятся результаты исследования структурных фазовых превращений кристаллов состава Cu_4SeTe в широком температурном интервале (300–773 К). Все температурные эксперименты по выявлению структурно-фазовых переходов в кристалле Cu_4SeTe выполнены на порошковом дифрактометре "D8 ADVANCE" фирмы "Bruker", в вакууме (10⁻² торр), режим: 40 кV, 40 мА, $\text{CuK}\alpha$ - $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$, $10 < 2\theta < 80$.

Для определения кристаллографических параметров, были синтезированы и получена дифракционная картина образцов Cu_4SeTe при 300 К для. На основе полученных дифракционных данных (2θ , d) определены кристаллографические параметры низкотемпературной фазы исследуемого объекта. Методом автоиндуцирования по программе "TOPAS" и уточнения данных по программе "EVA" было установлено, что низкотемпературная фаза Cu_4SeTe кристаллизуется в гексагональной структуре с периодами решетки $a = 4,178 \text{ \AA}$, $c = 41,921 \text{ \AA}$, ф.гр. R-3m, Z=12. Структура слоистая, шестипакетная и является политипной формой на базе структуры Cu_2Te .

После определения основных кристаллографических параметров низкотемпературной фазы Cu_4SeTe приступили к высокотемпературному исследованию в том же образце и режиме. Весь процесс исследованию регулировался в автоматическом режиме. Были получены рентгенодифракционные картины при различных температурах. Их сравнение показало, что в области 273К–573К наблюдается существенное изменение интенсивности дифракционных пиков за счет появления новых отражений и погасания ряда пиков, т.е. в данной области температуры произошёл фазовый переход.

На основе расчета дифрактограммы выявлено, что вблизи температуры 573 К низкотемпературная фаза превращается в примитивную кубическую фазу с $a=10,923 \text{ \AA}$, ф.гр. Pa-3.

В дальнейшем при температуре до 673 К полученная дифракционная картина оказалась идентичной с дифрактограммой при 573 К. Дальнейшее повышение температуры ($T=723 \text{ K}$) показало, что вблизи этой температуры примитивно кубическая фаза перешла в ГЦК фазу с периодом решетки $a=5,950 \text{ \AA}$, ф.гр. Fm3m, $Z=4$.

В заключение отметим, что в результате приведенных исследований установлено, что гексагональная \square фаза Cu_4SeTe вблизи 673 К переходит в примитивно кубическую (β), а около 773 К \square -ГЦК фазу. Процесс фазового превращения носит обратимый характер.

Динамика кинков в модели синус-Гордона при наличии локализованной пространственной модуляции параметров системы в виде точечного дефекта

Альмухаметова Алия Рафаэловна

Муртазин Рамиль Равилевич

Башкирский государственный университет

Екомасов Евгений Григорьевич, д.ф.-м.н.

alova4@yandex.ru

В последние годы динамика топологических солитонов (например, кинков) привлекает все большее внимание исследователей [1]. Это связано и с тем, что хотя первоначально солитоны возникли при изучении интегрируемых систем, очень скоро они стали применяться и для неинтегрируемых систем, описывающих много физических приложений [2]. Например, солитоны уравнения синус-Гордона в физике твердого тела описывают ДГ в магнетиках, дислокации в кристаллах, флюксоны в Джозефсоновских контактах и переходах и т.п. [2,3]. Во многих случаях поведение солитонов можно описать в модели точечной частицы, тогда их временная эволюция будет подчиняться простым дифференциальным уравнениям. Однако часто учет влияния возмущений приводит к существенному изменению структуры солитонов, которые уже нужно описывать как деформируемые частицы [2,3].

Возбуждение внутренних степеней свободы солитонов может играть определяющую роль в некоторых физических процессах [3]. Такие внутренние моды включают в себя трансляционные и пульсационные моды. Причем с последней модой связывают долгоживущие осцилляции ширины солитона. Известно, что невозмущенное уравнение синус – Гордона не имеет внутренних мод. В настоящее время большое внимание исследователей привлекает вопрос – какие возмущения могут возбудить внутренние моды солитонов уравнения синус – Гордона. Например, много работ посвящено изучению влияния зависящей от времени неоднородной внешней силы [3].

Не менее интересен и случай пространственной модуляции (неоднородности) параметров самой системы [2-5]. В слабо неоднородном случае можно считать, что наличие возмущений не меняет существенно форму солитонов модифицированного уравнения синус-Гордона (МУСГ), влияя в основном на их динамику [2]. В сильно неоднородном случае форма солитонов МУСГ должна претерпевать сильное изменение, следует ожидать возбуждения солитонных мод и излучение возбуждений отрывающихся от солитона в виде свободных волн [2].

В данной работе исследуется влияние пространственной модуляции параметров системы в виде точечного дефекта на динамику кинков модифицированного уравнения синус-Гордона. Рассмотрим МУСГ следующего вида [1]:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial x} \left[(1 + \alpha f(x)) \frac{\partial U}{\partial x} \right] + [1 + \beta f(x)] \sin U = 0, \quad (1)$$

где U – функция от координаты x и времени t . Если параметры α , ε и функцию, отвечающую за дефект $f(x)$, учитывать как малые, то это позволит рассматривать эти добавки как возмущение. Тогда можно считать, что их наличие не меняет существенно форму солитона УСГ, влияя в основном на его динамику. Уравнение (1) можно записать в следующем виде:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \sin U = F(x, t), \quad (2)$$

где $F(x, t) = -\varepsilon f(x) \sin U + \alpha f'(x) \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \alpha f''(x) \frac{\partial U}{\partial x}$, можно рассматривать как некое возмущение. Следует отметить, что случай $\alpha = 0$ был рассмотрен ранее [3].

В начальный момент времени имеется кинк, являющийся решением невозмущенного УСГ $U_k(x, t) = 4 \operatorname{arctg} \exp[x - q]$, где q – координата центра солитона. Решение уравнения (2) ищем в виде $U = U_s(x - q)$. Граничные условия для перегиба имеют вид $U_s(-\infty) = 2\pi$; $U_s(\infty) = 0$. Функцию $f(x)$ берем в виде дельта-функции $f(x) = \delta(x)$.

Проведя вычисления, получим уравнение движения ньютоновского вида для координаты центра кинка:

$$m \frac{d^2 q}{dt^2} = (4\varepsilon + 4\alpha) \frac{sh(q)}{ch^3(q)}, \quad (3)$$

где $m^* = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\partial U_s}{\partial x} \right)^2 dx$ – эффективная масса кинка, в нашем случае $m^* = 8$. Решая уравнение (3) получали

зависимости скорости кинка и координаты центра кинка от времени для разных значений параметров дефекта α , ε .

Уравнение (1) также решалось численно с использованием явной схемы интегрирования [5]. Изучалась структура кинка при прохождении точечного дефекта. Исследовалась эволюция захваченного в дефекте кинка. Были определены внутренние моды кинка – трансляционная и пульсационная. Вычислена минимальная скорость необходимая для преодоления дефекта. Результаты, полученные численно и аналитически, для случая малых параметров дефекта α и ε хорошо согласуются между собой.

В численном эксперименте исследовано зарождение и эволюция нелинейной волны солитонного вида типа слабозатухающего бризера, возникающего после прохождения кинком точечного дефекта. Найдены зависимости амплитуды и частоты колебаний бризера от параметров дефекта.

Список публикаций:

- [1] Remoissenet M. *Waves called solitons*. Berlin, Springer, 1996. 260 p.
- [2] Косевич А. М., Ковалев А. С. *Введение в нелинейную физическую механику*. Киев: Наукова думка, 1989. 536 с.
- [3] Браун О. М., Кившарь Ю. С. *Модель Френкеля-Конторовой: Концепции, методы, приложения*. М.: Физматлит, 2008.
- [4] Шамсутдинов М. А., Назаров В. Н., Ломакина И. Ю., Харисов А. Т., Шамсутдинов Д. М. *Ферро- и антиферромагнетодинамика. Нелинейные колебания, волны и солитоны*. М.: Наука, 2009. 456 с.
- [5] Екомасов Е. Г., Азаматов Ш. А., Муртазин Р. Р. // ФММ. 2008. 105. С. 341–349.
- [6] Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. *Численные методы*. М.: Наука, 1987. 600 с

Теоретическое изучение графана с адсорбированными атомами щелочных металлов (Li, Na, K) как перспективного материала для хранения водорода

Любовь Юрьевна Антипина¹

Татьяна Павловна Сорокина¹, Павел Борисович Сорокин^{1,2}

¹ *Технологический институт сверхтвёрдых и новых углеродных материалов*

² *Институт биохимической физики им. Н.М.Эммануэля РАН*

antipinalyu@gmail.com

Отсутствие материала для эффективного хранения водорода – одна из основных проблем для его использования в качестве экологически чистого альтернативного топлива. Углеродные наноструктуры изначально привлекли к себе внимание как потенциальные объекты для хранения водорода благодаря их малому весу и большой удельной площади поверхности. Так, были опубликованы работы, посвященные исследованию нанотрубок [1,2], графена [3,4], и фуллеренов [5] как возможных эффективных сорбентов

водорода. Перспективность использования углеродных наноструктур, декорированных атомами металла для сорбции водорода была подтверждена в экспериментальной работе [6], где было показано что на углеродных нанотрубках или графите, с адсорбированными атомами металлов при стандартных условиях может адсорбироваться до 20 % вес. водорода. Также перспективным материалом для подложки может выступать графан (Gr). Графан был впервые предсказан в работе Софо и др. [7], а синтезирован в эксперименте [8]. Его структура представляет собой лист графена с адсорбированными атомами водорода на каждом атоме углерода.

В данной работе проводилось исследование органометаллических комплексов графана с щелочными металлами (литием, Li-Gr, натрием, Na-Gr, и калием, K-Gr) как возможных перспективных объектов для хранения водорода. Мы провели анализ комплексов металл-графан (Me-Gr), и нашли наиболее энергетически стабильные конфигурации с энергией связи, достаточной для их использования в качестве основы для последующей сорбции молекулярного водорода. Все представленные в работе расчёты были выполнены в рамках теории DFT с приближением LDA в параметризации Пердью-Зунгера [9] с использованием пакета Quantum Espresso [10]. Работа была выполнена на суперкомпьютерах 'Ломоносов' МГУ имени М.В. Ломоносова и суперкомпьютере «МВС-100К» межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

Изучение сорбции водорода на предложенных комплексах показало, что система Me-Gr при нормальном давлении ($P = 1$ атм) и температуре $T = 0$ К может адсорбировать до 4 молекул водорода на атом металла с энергией связывания порядка 0.2 эВ (рис.1), т.о. предел содержания водорода в структурах Li-Gr, Na-Gr и K-Gr составляет 12.2 %, 10.33% и 8.56 % вес. соответственно. Данный результат соответствует общепризнанным требованиям американского энергетического департамента (DOE) содержания адсорбированного водорода для его промышленным использования на транспорте (6-7 % вес.).

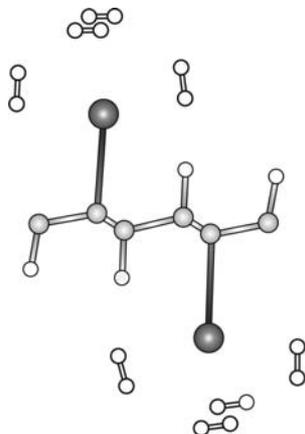


рис. 1. Изображение структуры Gr-Me с адсорбированными 4-я молекулами водорода. Белым, светло-серым и темно-серым обозначены атомы водорода, углерода и металла, соответственно.

Было проведено исследования влияния температуры и давления на адсорбцию водорода на комплексе Me-Gr. В случае системы Na-Gr структура с четырьмя адсорбированными молекулами H_2 на каждом атоме натрия будет стабильна при низких температурах ($T < 250$ К). K-Gr может сорбировать до 2-х молекул водорода при давлениях порядка 100 атм ($T = 300$ К), а сорбция 4-х молекул происходит в более жестких условиях. Система Li-Gr кажется наиболее перспективной в качестве адсорбента для водорода, т.к. в на ней может быть адсорбировано 3 молекулы водорода на каждый атом лития при $T = 300$ К в диапазоне давлений от 5 до 250 атм. Система, содержащая 4 молекулы H_2 на атоме Li становится стабильной при низких температурах и/или более высоком давлении.

Следует заметить, что сделанные оценки являются приблизительными, и не учитывают тепловой кинетики системы, однако, полученные данные могут служить ориентиром для изучения систем Me-Gr как перспективных материалов для водородной энергетике.

Список публикаций:

- [1] Liu C., Fan Y.Y., Liu M., et al. // *Science*. 1999. V. 286 (5442). P.1127.
- [2] Fedorov A., Sorokin P., Kuzubov A., et al. // *Phys. Status Solidi (b)*. 2008. V. 245 (8). P.1546.
- [3] Patchkovskii S., Tse J.S., Yurchenko S.N., et al. // *Proc. Nat. Acad. Sci.*. 2005. V. 102P.10439.
- [4] Singh A.K., Ribas M.A., Yakobson B.I., et al. // *ACS Nano*. 2009. V. 3 (7). P.1657.
- [5] Pupyshcheva O.V., Farajian A.A., Yakobson B.I., et al. // *Nano Lett.*. 2007. V. 8 (3). P.767.
- [6] Chen P., Wu X., Lin J., et al. // *Science*. 1999. V. 285 (5424). P.91.
- [7] Sofo J.O., Chaudhari A.S., Barber G.D., et al. // *Phys. Rev. B*. 2007. V. 75 (15). P.153401(4).
- [8] Elias D., Nair R., Mohiuddin T., et al. // *Science*. 2009. V. 323 (5914). P.610.
- [9] Perdew J.P., Zunger A. // *Phys. Rev. B*. 1981. V. 23 (10). P.5048.
- [10] Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., et al. // *J. Phys.: Cond. Matter*. 2009. V. 21 (39). P.395502(19).

Исследование зависимости скорости распыления поликристаллических мишеней SiC-AlN от мощности возбуждения разряда

Архипов Александр Владимирович

Билалов Биалал Аругович, Сафаралиев Гаджимет Керимович, Кардашова Гульнара Дарвинона, Гусейнов Марат Керимханович, Абдуразаков Абдула Ахмедович

Дагестанский государственный технический университет

Билалов Биалал Аругович, д.ф.-м.н.

alexandr_87@pochta.ru

Перспективное развитие технологий и техники накладывает на полупроводниковые приборы повышенные требования. Карбид кремния (SiC) и нитрид алюминия (AlN) образуют неограниченные по составу псевдобинарные твердые растворы (SiC)_{1-x}(AlN)_x с шириной запрещенной зоны от 2,8 до 5 эВ в зависимости от состава. SiC и AlN чрезвычайно устойчивы к высокотемпературным, механическим, химическим и радиационным воздействиям. Аналогичными свойствами обладают твердые растворы (SiC)_{1-x}(AlN)_x.

Процесс формирования пленок твердых растворов (SiC)_{1-x}(AlN)_x их свойства во многом зависят от величины скорости распыления V_p . Поэтому исследование зависимости скорости распыления от мощности возбуждения разряда имеет важное значение для получения пленок (SiC)_{1-x}(AlN)_x с заданными параметрами.

Скорость распыления определялась методом измерения толщины распыленного слоя по высоте ступеньки h , которая образуется на поверхности мишени при ионной бомбардировке его части. Измерения h проводились с помощью интерферометра МИИ-4.

На рис.1 представлены зависимости скорости магнетронного распыления мишеней SiC-AlN от мощности возбуждения разряда при давлении аргона $3 \cdot 10^{-2}$ мм.рт.ст.

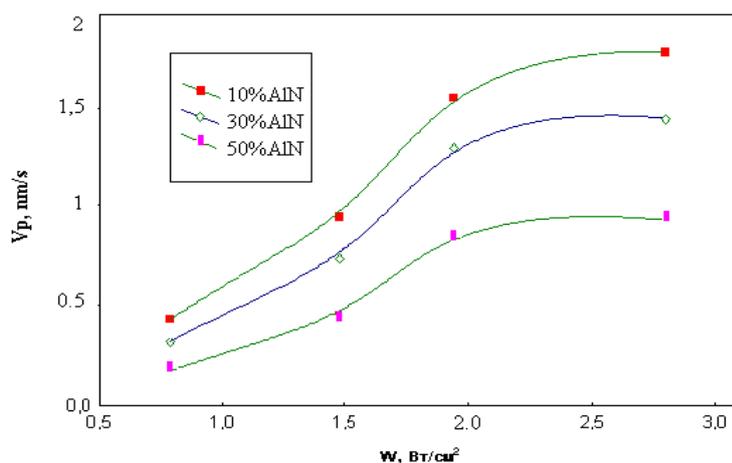


рис.1. Зависимость скорости магнетронного распыления мишеней SiC-AlN от плотности мощности разрядного тока

Из графика видно, что скорость распыления мишеней во всех образцах вначале быстро увеличивается, затем постепенно достигает насыщения. Подобная зависимость объясняется увеличением степени ионизации аргона с увеличением мощности разряда и, следовательно, концентрации частиц бомбардирующих мишень. По мере истощения количества атомов аргона, участвующих в процессе ионизации, скорость распыления достигает насыщения.

Исследование процессов ионного распыления горячепрессованных мишеней SiC-AlN выявило, что параметры процессов распыления зависят от состава мишеней. Скорость распыления мишеней SiC-AlN уменьшается с увеличением содержания AlN (рис.1). Вероятно, это связано с тем, что с увеличением содержания AlN, растет плотность горячепрессованных мишеней SiC-AlN, возрастает энергия взаимодействия различных атомов мишени [1].

Эффективность процесса ионного распыления характеризуется коэффициентом распыления, который численно равен количеству атомов вещества, распыленных одним бомбардирующим ионом. Коэффициент распыления S зависит от массы обрабатываемого вещества m_1 , массы иона m_2 , его энергии E и угла падения θ , а также от физического состояния поверхности:

$$S = \frac{km_1m_2E}{\lambda(m_1 + m_2)} \quad (1)$$

где k – коэффициент, характеризующий состояние поверхности; λ – средняя длина свободного пробега иона в обрабатываемом материале, который зависит от угла падения ионов θ .

Для ионного распыления при нормальном падении ионов ($\theta=0$) коэффициент распыления связан с массой распыляемого материала соотношением:

$$S = \frac{N_a m Z_e}{A I_u t} \quad (2)$$

где $N_a=6.02 \cdot 10^{23}$ моль⁻¹ – число Авогадро; Z_e – заряд иона; I_u – ток ионов; t – длительность бомбардировки, с; A – атомная масса вещества мишени; m – масса распыляемого материала, кг.[2].

Согласно этому выражению, по результатам исследований скорости распыления мишеней твердых растворов $(SiC)_{1-x}(AlN)_x$ от их состава были определены коэффициенты распыления при энергиях ионов 0.5 кэВ. Результаты этих расчетов представлены в таблице 1. Таблица 1.

Содержание AlN в тв.раств., %мол	0	10	30	50
S атом/ион	0,41	0,27	0,24	0,18

Скорость осаждения v материала на подложке пропорциональна скорости распыления мишени. В общем случае величина скорости осаждения выражается соотношением:

$$v = c\gamma I \quad (3)$$

где c – экспериментальная константа, которая сильно зависит от взаимного расположения частей системы, I – ионный ток, γ – коэффициент распыления.

Список публикаций:

[1] Данилин Б.С., Киреев В.Ю., Назаров Д.А. Реактивное ионное травление. -Обзоры по электронной технике, сер.3, Микроэлектроника, 1984, вып.1 (1010),71с.

[2] Технология сверхбольших интегральных схем/ под ред.С.Зи. М.: Мир, 1986.-Т. 1.-404 с.

Моделирование структуры электронных устройств на основе селективно графитированных графеновых слоев

Беленкова Татьяна Евгеньевна

Андреева Анна Алексеевна

Челябинский государственный университет

Чернов Владимир Михайлович, д.ф.-м.н.

belenkov@csu.ru

Углеродные наноструктуры – графеновые слои, углеродные нанотрубки и графеновые ленты, фуллерены имеют нанометровые размеры в одном, двух или трех кристаллографических направлениях, что обуславливает проявление квантовых свойств. Так электропроводность линейных углеродных наноструктур – нанотрубок и графеновых лент, имеющих макроскопические размеры в одном кристаллографическом направлении, может изменяться от металлических до полупроводниковых. Такие углеродные наноструктуры можно использовать в качестве основы для различных наноэлектронных устройств. Технологическая сложность создания наноэлектронных устройств на основе нанотрубок и графеновых лент связана с тем, что фрагменты наноструктур необходимо каким-то образом соединять в электронные схемы. Более простой способ получения наноэлектронных устройств возможен из графеновых слоев. Графеновые слои получают в результате образования химических соединений графеновых слоев с водородом, фтором, хлором и т.д. Затем графеновые слои можно подвергнуть локальной графитации, т.е. удалить с некоторых участков поверхности неуглеродные атомы, присоединяющие к слою. В результате, получаются графеновые дорожки-ленты с проводящими свойствами, варьирующимися от металлических до полупроводниковых, которые могут быть основой для электронных схем, выполняющие различные функции. В качестве инструмента для локальной графитации поверхности графана можно использовать зонд туннельного микроскопа. В этом случае, желательно чтобы неуглеродные атомы присоединялись к графеновому слою только с одной стороны. Вопрос о возможности получения таких слоев остается открытым.

На первом этапе в данной работе был выполнен расчет структуры графеновых слоев, полученных образованием химических связей между графеновыми слоями и атомами различных элементов (H, O, F, Cl) и молекулярными группами (OH). Были рассмотрены два возможных способа соединения неуглеродных атомов с графеновым слоем – с одной стороны и с двух сторон. Геометрически оптимизированная структура различных слоев рассчитывалась методом молекулярной механики ММ+. Как показали модельные расчеты в случае присоединения неуглеродных атомов с двух сторон графеновый слой имеет плоскую упорядоченную структуру (рис.1а). Если же неуглеродные атомы присоединяются к графеновому листу с одной стороны, то слой имеет деформированную структуру, край графенового листа сворачивается, формируя трубчатые структуры (рис.1б), что делает невозможным использование таких слоев для локальной графитации. Для всех графеновых слоев были найдены параметры a двумерных элементарных ячеек. Численные значения параметра a изменяются от 2,56 до 3,08 Å. В графеновых слоях значение параметра a составляет 2,44 Å. Параметры элементарных ячеек соединений графеновых слоев с атомами H, O, F, Cl или гидроксогруппами максимально приближены к значению параметра для графенового слоя в том случае, когда неуглеродные атомы присоединены с двух сторон. Для графано-водородного слоя параметр элементарной ячейки равен 2,56 Å, для графано-кислородного 2,57 Å, для графано-фторного параметр имеет значение 2,59 Å.

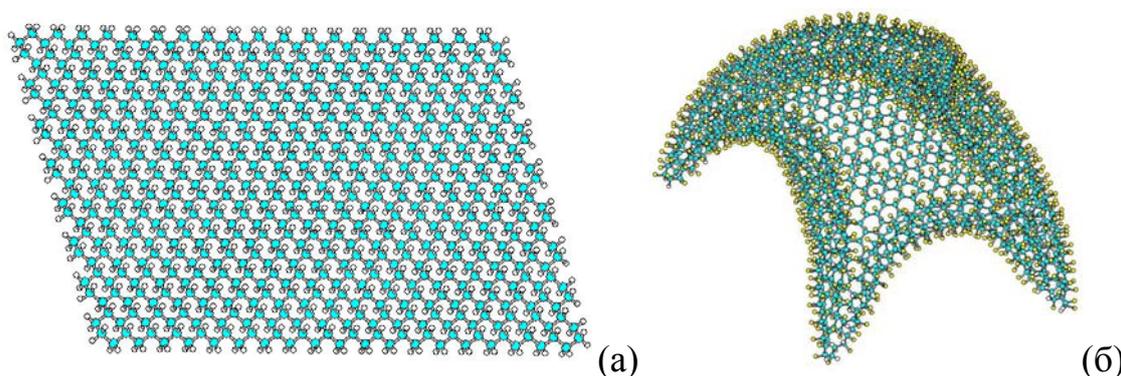


рис.1. Геометрически оптимизированная структура: (а) графано-водородного слоя (атомы водорода присоединены с двух сторон); (б) графано-хлорного слоя (атомы хлора присоединены с одной стороны).

На втором этапе работы были выполнены расчеты геометрически оптимизированной структуры селективно графитированных плоских графано-водородных слоев. Электронные свойства графеновых лент, полученных в результате локального удаления с поверхности слоев атомов водорода, должны быть аналогичны свойствам графеновых лент или углеродных нанотрубок, которые из этих лент можно получить. Ленточные графеновые фрагменты на графеновом слое могут иметь различную хиральность (zigzag, armchair, chiral) и различные проводящие свойства. В результате селективного удаления атомов водорода на поверхности графенового слоя можно сформировать соединение нескольких графеновых лент между собой. Соединения ленточных фрагментов с полупроводниковой и металлической проводимостью могут выполнять функции наноразмерных диодов. Пример такого соединения - соединение полупроводниковой zigzag ленты (4,0) с металлической лентой (2,2). На основе таких соединений возможно конструирование различных электронных устройств. Например, четыре соединения графеновых лент (4,0)-(2,2), полученных в результате селективной графитации на поверхности графано-водородного слоя, являются диодным мостом и могут использоваться для выпрямления переменного электрического тока (рис.2). Возможные затруднения при практическом получении таких наноструктур заключаются в необходимости точно селективно удалять неуглеродные атомы с обеих сторон графеновых слоев.

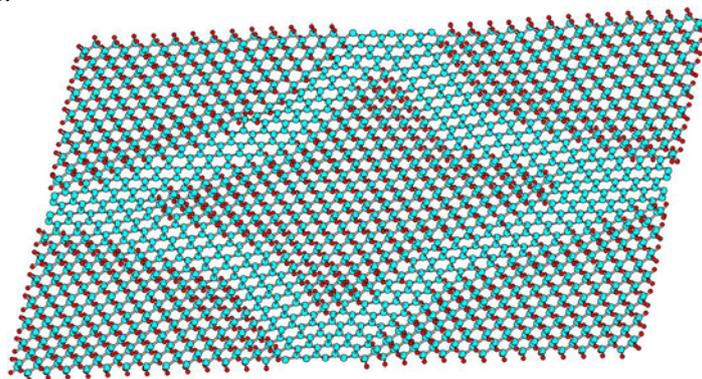


рис.2. Диодный мост, полученный в результате селективной графитации графано-водородного слоя (мост образован четырьмя парными соединениями графитированных лент (4,0)-(2,2), играющих роль наноразмерных диодов, атомы водорода присоединены с двух сторон графенового слоя).

Метод квантового Монте-Карло для обменного кулоновского взаимодействия в рамках схемы LDA+DMFT на примере α -железа

Белозеров Александр Сергеевич

Анисимов Владимир Ильич, Потеряев Александр Иванович, Леонов Иван Васильевич

Институт физики металлов УрО РАН

Анисимов Владимир Ильич, д.ф.-м.н.

alexander.s.belozеров@gmail.com

Методы расчета электронной структуры из первых принципов в последнее время активно развиваются и успешно применяются для корректного описания все большего числа соединений с различными физическими свойствами [1]. Одним из наиболее эффективных методов для исследования систем с сильными кулоновскими корреляциями является метод LDA+DMFT [2], в котором одноэлектронная часть Гамильтониана описывается в приближении локальной электронной плотности (LDA), а локальная составляющая электрон-электронного взаимодействия на узле учитывается с помощью теории динамического среднего поля (DMFT) [3]. В рамках DMFT решеточная задача сходится к эффективной однопримесной модели Андерсона, которая может быть решена с помощью существующих численных методов. Наиболее широкое распространение для решения однопримесной модели Андерсона получили методы квантового Монте-Карло (QMC) в алгоритме Хирша-Фая (HF-QMC) и в алгоритме с непрерывным временем (CT-QMC). Однако зачастую использование данных методов требует значительных вычислительных ресурсов, что приводит к ограничению области их применения.

Ряд соединений, в которых кулоновские корреляции играют существенную роль, далеки от перехода металл-изолятор, но, тем не менее, обладают значительными локальными магнитными моментами. Наиболее известными примерами являются железо, никель, кобальт, а также их соединения. Для описания таких соединений, в которых определяющую роль играет обменное кулоновское взаимодействие, приводящее к формированию локальных магнитных моментов, мы предлагаем метод квантового Монте-Карло (J-QMC), основанный на непрерывной преобразовании Хаббарда-Стратоновича [4], для решения однопримесной модели Андерсона в рамках подхода LDA+DMFT. Запишем Гамильтониан кулоновского взаимодействия на примеси в виде

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2}(U - \frac{J}{2})\hat{N}(\hat{N} - 1) - \frac{1}{4}J\hat{M}^2 + \frac{1}{2}J\hat{N}, \quad (1)$$

где U и J - параметры прямого и обменного кулоновского взаимодействия, \hat{N} - оператор полного числа электронов, \hat{M} - оператор магнитного момента примеси. Используя приближение статического среднего поля для первого слагаемого в уравнении (1) и вводя поправку на двойной учет кулоновского взаимодействия, получим полный гамильтониан системы в следующем виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_{LDA} + (U - \frac{J}{2})(n_d - n_d^0)\hat{N} - \frac{1}{4}J\hat{M}^2, \quad (2)$$

где \hat{H}_{LDA} - Гамильтониан, соответствующий приближению LDA; $n_d = \langle \hat{N} \rangle$ - полное число примесных электронов, n_d^0 - полное число электронов на примесном атоме в LDA. Применение непрерывного преобразование Хаббарда-Стратоновича [4] для третьего слагаемого в уравнении (2) позволяет записать статистическую сумму системы как функциональный интеграл по флуктуирующим магнитным полям $\xi(\tau)$:

$$Z = Tr[\exp(-\beta\hat{H})] = \int D\xi(\tau) \exp[-\frac{\pi}{\beta} \int_0^\beta \xi(\tau)^2 d\tau] Z(\xi), \quad (3)$$

$$Z(\xi) = Tr \left\{ T_\tau \exp[-\beta\hat{H}_{LDA} - \beta(U - \frac{J}{2})(n_d - n_d^0)\hat{N} + \int_0^\beta c\xi(\tau)\hat{M} d\tau] \right\},$$

где β - обратная температура, $c = \sqrt{\pi J / \beta}$. Таким образом, статистическая сумма, а также функция Грина примеси могут быть рассчитаны численно.

Плотности электронных состояний для α -железа, полученные с помощью методов HF-QMC и J-QMC в рамках подхода LDA+DMFT, при $\beta = 10 \text{ эВ}^{-1}$ представлены на *рис. 1*. Для расчетов использовались $U = 2.3 \text{ эВ}$, $J = 0.9 \text{ эВ}$ [5,6]. Оба метода дали достаточно близкие результаты и позволили воспроизвести расщепление вблизи уровня Ферми, обусловленное обменным кулоновским взаимодействием, что находится в согласии с результатами предыдущих исследований [5,6]. Таким образом, предложенный метод позволяет описать

электронную структуру α -железа, при это он значительно менее требователен к вычислительным ресурсам, чем широко используемые методы квантового Монте-Карло в рамках схемы LDA+DMFT.

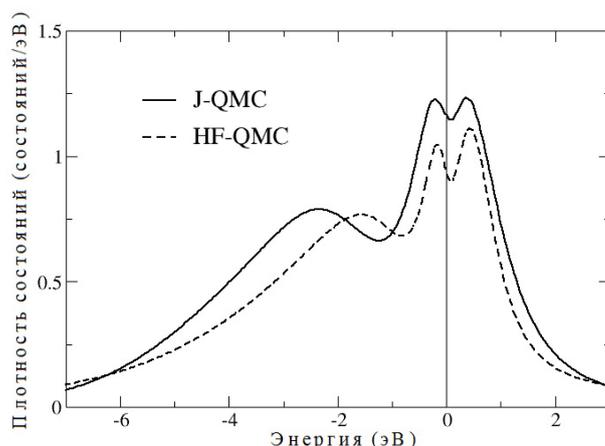


рис.1. Плотности электронных состояний для α -железа, полученные с помощью методов HF-QMC и J-QMC в рамках подхода LDA+DMFT. Уровень Ферми находится в нуле.

Список публикаций:

- [1] V. Anisimov, Yu. Izyumov, *Electronic Structure of Strongly Correlated Materials. Springer Series in Solid State Sciences* (2010).
- [2] V. Anisimov, A. Poteryaev, M. Korotin, A. Anokhin, and G. Kotliar, *J. Phys. Condens. Matter* 9, 7359 (1997).
- [3] A. Georges, G. Kotliar, et al., *Rev. Mod. Phys.* 68, 13-125 (1996).
- [4] J. Hubbard, *Phys. Rev. Lett.* 3, 77 (1959).
- [5] A.I. Lichtenstein, M.I. Katsnelson, and G. Kotliar, *Phys. Rev. Lett.* 87, 067205 (2001)
- [6] A.A. Katanin, et al., *Phys. Rev. B.*, 81, 045117 (2010).

Получение компактов из наноразмерного порошка оксида алюминия методом одноосного магнитно-импульсного прессования с использованием различных концентраторов механического импульса

Боков Арсений Александрович

Институт электрофизики УрО РАН

Ноздрин Андрей Александрович

bokov.arseniy@gmail.com

Порошковый способ, реализуемый через прессование и дальнейшее термическое спекание, позволяет получать твердые материалы с наноразмерной структурой. При этом большое значение имеет достижение высокой степени уплотнения порошка на стадии механического воздействия – прессования. При высокой плотности прессовок, более 0,7 от теоретического значения, процессы спекания протекают с наименьшими энергозатратами – быстрее и при низких температурах $\geq 0,5T_{пл}$ ($T_{пл}$ - температура плавления). Это позволяет избегать укрупнения зерна на стадии спекания прессовок и, как следствие, получать материал с наноструктурой.

Метод одноосного магнитно-импульсного (МИ) прессования зарекомендовал себя тем, что позволяет достигать более высокой степени уплотнения порошков в сравнении со статическим компактированием. В работе [1] на примере наноразмерного порошка оксида алюминия было показано, что достигаемые таким способом плотности на ~15% превышают плотности, получаемые при том же уровне статических давлений в условиях одноосного сжатия.

Метод МИ прессования реализуется путем индукционного ускорения жесткой проводящей плиты (механического концентратора). В ходе ускорения концентратор аккумулирует механический импульс и передает его пуансону, сжимающему порошок в матрице. Использование пуансона с площадью поперечного сечения во много раз меньшей площади поверхности концентратора удастся создать высокое давление пуансона на порошок при умеренном давлении на индуктор. Но в работах авторов, развивающих этот метод, не было уделено внимание влиянию параметров концентратора на достигаемые степени уплотнения порошков.

С целью изучения влияния параметров концентратора на процессы прессования, в данной работе были произведены эксперименты с тремя концентраторами. Первый изготовлен из конструкционной стали марки 45ХН2МФА, на нижнем основании для эффективности ускорения напрессован медный диск толщиной 5 мм.

Второй концентратор полностью изготовлен из сплава алюминия В95. Корпус третьего концентратора изготовлен из сплава В95, на нижнем основании напрессован медный диск толщиной 5 мм. Массы концентраторов 4,4; 1,49 и 2,03 кг соответственно.

Для экспериментов был использован наноразмерный порошок оксида алюминия (средний размер частиц $d_{\text{ВЕТ}} = 21$ нм). Порошок не проходил процедуру удаления адсорбированных веществ. Прессование порошков производилось на одноосном магнитно-импульсном прессе «ТОР» (850 кН) при напряжениях на накопителе – 1,5; 2,0; 2,5 кВ для первого и второго, 1,5; 2,0; 2,25 кВ для третьего концентратора. Диаметр используемой пресс-формы – 15 мм. Плотность засыпки 0,35 от теоретического значения.

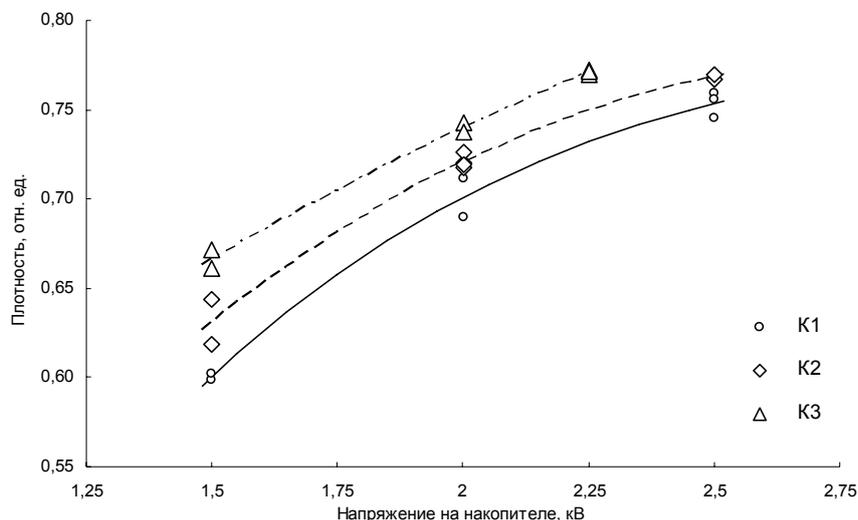


рис.1. Зависимость плотности полученных прессовок от напряжения на накопителе для различных концентраторов механического импульса

Обозначения на графике K1, K2, K3 относятся к первому, второму и третьему концентратору соответственно. Из рисунка видно, что наибольшие плотности прессовок достигаются с третьим концентратором, а наименьшие – с первым. Это связано с тем, что первый концентратор имеет большую массу, и как следствие, разгоняется намного медленнее даже при наличии высокопроводящего медного диска на нижнем основании. Третий концентратор совмещает в себе легкость и высокую проводимость, поэтому разгоняется эффективнее остальных. Второй концентратор занимает промежуточную позицию. Он имеет самый маленький вес, но проводимость алюминия существенно ниже проводимости меди, поэтому он ускоряется не так эффективно, как третий. Так же стоит отметить, что плотности, получаемые третьим концентратором при напряжении на накопителе 2,0 кВ практически равны плотностям, получаемым с использованием первого концентратора при напряжении 2,5 кВ. При использовании третьего концентратора при напряжении 2,5 кВ в образце возникало давление более 2 ГПа. Даже при таком уровне давления в образце корпус третьего концентратора из легкого сплава В95 не претерпевал деформаций. Но при таком уровне давления в образце возможно повреждение прессующего пуансона. По этой причине для экспериментов с третьим концентратором напряжения на накопителе не поднималось выше 2,25 кВ.

Известно, что стабильность работы установок по генерации больших импульсных магнитных полей определяется наиболее слабым элементом – индуктором [2]. Получение прессовок нужных плотностей при пониженном напряжении на накопителе энергии позволяет уменьшить тепловое и механическое воздействие на индуктор и, как следствие, увеличить срок его службы. Помимо увеличения срока эксплуатации, работа на более низких напряжениях снижает энергозатраты. Таким образом, использование оптимального по своим параметрам концентратора позволяет достигать более высоких степеней уплотнения наноразмерных порошков и увеличивает эффективность работы установки в целом.

Работа выполнялась при частичном финансировании по проекту Уральского отделения РАН 2012-2014 гг. №12-У-2-1029 «Электрофизические аспекты магнитно-импульсной обработки материалов».

Список публикаций:

- [1] Иванов В.В., Вихрев А.Н., Ноздрин А.А., Паранин С.Н. - Эффективность динамического метода уплотнения наноразмерных порошков. // *Материаловедение*, 1997, №5, С.49-55.
 [2] Латугин А.С., Ожогин В.И. Сильные импульсные магнитные поля в физическом эксперименте. // *Энергоатомиздат*, 1988, 192 С.

Магнитооптические свойства многослойных пленок Co/TiO₂

Бондаревский Александр Александрович

Табакаев А. И.

Сибирский федеральный университет

Полякова Клавдия Павловна

aleeb@mail.ru

Значительный интерес, который вызывают в настоящее время нанокompозитные пленки, обусловлен целым рядом проявляемых ими необычных и практически важных свойств, делающих их чрезвычайно перспективным объектом, как для фундаментальных, так и для прикладных исследований. Различают два типа магнитных нанокompозитных систем: в виде наногранулированных пленок, состоящих из ферромагнитных нанокластеров, находящихся в непроводящей матрице и в виде периодических структур ферромагнитный металл/немагнитный металл (или диэлектрик). Обнаруженное усиление магнитооптических эффектов в периодических пленочных структурах магнитный металл/диэлектрик открывает новый класс магнитооптических материалов. Известно, что магнитооптические свойства неоднородных систем магнитный металл/немагнитный диэлектрик определяются диэлектрическими константами магнитных слоев и немагнитных слоев. В связи с этим представляют интерес магнитооптические свойства многослойных пленок Co/TiO₂ с прослойкой TiO₂ с диэлектрической константой, превышающей соответствующие значения SiO₂ и Al₂O₃, наиболее часто используемых в периодических пленочных структурах.

В настоящей работе представлены результаты исследования магнитооптических свойств многослойных пленок Co/TiO₂. Для получения композитных пленок Co/TiO₂ в едином вакуумном цикле использовалась вакуумная установка ионно-плазменного распыления УРМ.50. Композитные пленки Co/TiO₂ в виде слоистой периодической структуры Co/TiO₂ с числом пар слоев $n=4$ были получены путем последовательного осаждения слоев Co и оксида титана методом ионно-плазменного распыления и реактивного распыления соответственно. В качестве подложки использовались покровные стекла. Нанесение слоев осуществлялось на относительно холодную подложку при $T=320$ К. В результате получена серия композитных пленок в виде слоистых периодических структур Co/TiO₂ с числом пар слоев $n=4$ с толщиной слоя Co 5 nm и толщинами слоев TiO₂ 10, 13, 17, 20, 25, 30 nm. Измерение величин полярного магнитооптического эффекта Керра (θ_k), а также спектральных зависимостей осуществлялось по методике нуль-анализатора с двойной модуляцией плоскости поляризации падающего света по азимуту на магнитооптической установке (МО стенд) в полях до 14 кОе. Измерения проводились при комнатной температуре в интервале длин волн 350-1000 nm. Точность измерения составляла 0.2 min.

Исследования спектральных зависимостей полярного эффекта Керра слоистых структур Co/TiO₂ с числом пар слоев $n=4$ для различных толщин слоев TiO₂ показали, что спектры многослойных структур для толщин оксида титана 13, 17, 20, 25, 30 nm носят резонансный характер. При этом наблюдается значительное усиление (от 4 до 7 раз в сравнении со сплошными пленками Co) угла керровского вращения вблизи резонанса. Установлено, что максимальное значение угла вращения (в резонансе) зависит от толщины прослойки TiO₂ (рис.1) и достигает значения $2\theta_k=4.5$ deg. в слоистой структуре с толщиной прослойки окиси титана 20 nm на длине волны 600 nm.

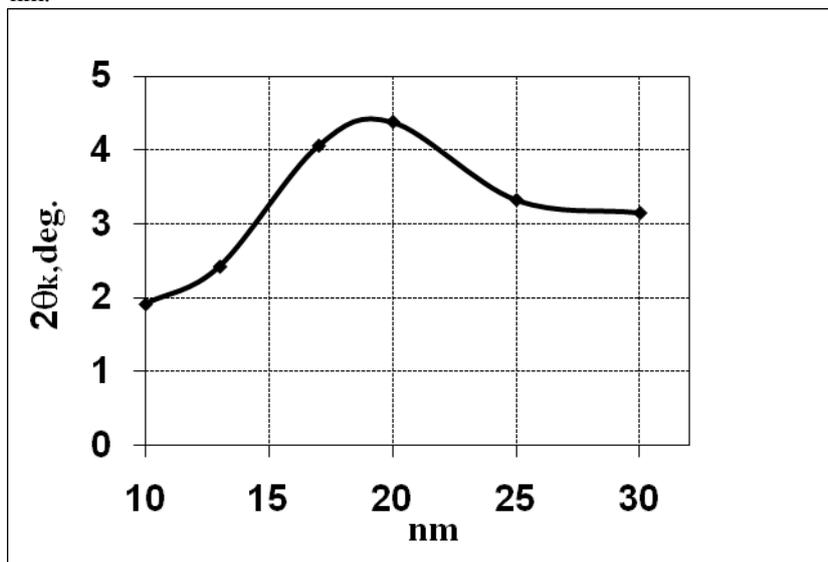


рис.1. Зависимость максимального угла керровского вращения от толщины слоя TiO₂.

Показано, что для слоистой структуры с толщиной прослойки 17 нм вращение в резонансе меньше, чем для структуры с прослойкой титана 20 нм, однако кривая резонанса имеет более узкую ширину резонанса.

Отметим, что толщина диэлектрической прослойки влияет не только на значение вращения в резонансе, но и положение резонанса на шкале длин волн. Для пленок с толщинами немагнитной прослойки 13, 17, 20, 25 нм наблюдается сдвиг положения максимум в длинноволновую область при увеличении притолицины прослойки.

Основные результаты проведенных исследований магнитооптических свойств периодических пленочных структур Co/Ti-O, полученных методом ионно-плазменного распыления, сводятся к следующему:

- Получены многослойные пленки Co/TiO₂ с числом пар слоев равным 4, толщиной магнитного слоя 5 нм и переменной толщиной прослойки оксида титана: 10, 13, 17, 20, 25, 30 нм.
- Проведены исследования спектральной зависимости полярного эффекта Керра полученных пленок.
- Показано, что спектральные зависимости эффекта Керра пленок с толщинами прослойки окиси титана 13, 17, 20, 25, 30 нм носят резонансный характер со значительным усилением керровского вращения в резонансе.
- Установлена немонотонная зависимость угла керровского вращения от толщины немагнитной прослойки.

Влияние гидростатического давления на структуру и электронные свойства кристалла сульфата натрия

Бугаева Инна Александровна

Кемеровский государственный университет

Журавлев Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.

inkas88@yandex.ru

Повышенный интерес исследователей к сульфатам щелочных металлов вызван их уникальными электрическими, оптическими и механическими свойствами. Целью данного исследования является изучение влияния гидростатического давления на структурные и электронные свойства кристалла Na₂SO₄.

В настоящей работе вычисления геометрии и электронной структуры кристалла Na₂SO₄ выполнены при помощи пакета CRYSTALL09 в рамках теории функционала плотности (DFT) в комбинации обменного и корреляционного функционалов в приближении локальной плотности PWGGA. Для расчета использовались следующие базисные наборы: Na_8-511G, S_86-311G* и O_6-31d1 [1].

При комнатной температуре Na₂SO₄(III) имеет ромбическую структуру с группой симметрии D_{2h}^{17} и Z=2: a=5.627 Å, b=8.966 Å, c=6.974 Å [2]. Оптимизация геометрии кристалла позволяет проследить за изменением его структурных параметров под давлением в интервале -2...30 ГПа. Постоянные решетки a, b, c уменьшаются, постоянная b более сжимаема (рис. 1). Следовательно, объем кристалла с увеличением давления также уменьшается. При отрицательных давлениях постоянные решетки и объем кристалла Na₂SO₄ возрастают.

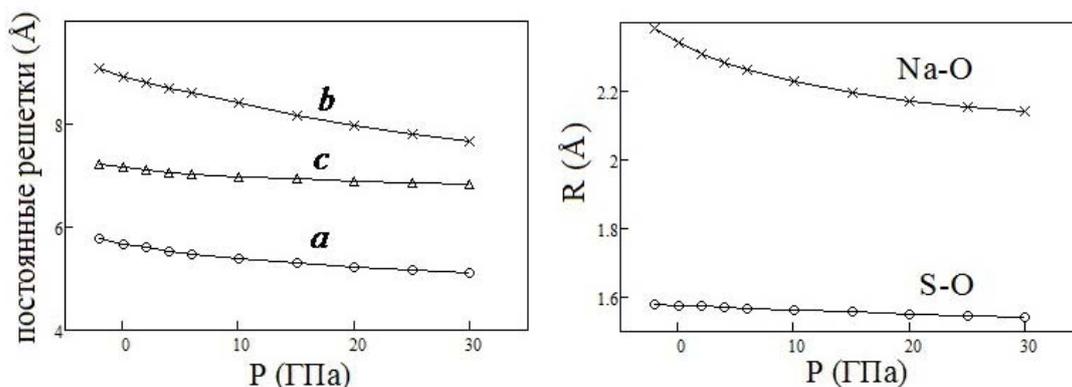


рис. 1. Зависимость постоянных решетки (слева) и межатомных расстояний (справа) от гидростатического давления.

С увеличением давления все межатомные расстояния уменьшаются. Расстояния S-O практически не изменяются с увеличением давления, тогда как между атомами Na-Na и Na-O существенно уменьшаются (рис. 1). Таким образом, давление слабо влияет на внутримолекулярную структуру.

Установлено, что заряд атома натрия с увеличением давления уменьшается по закону близкому к линейному. При этом заряды атомов серы и кислорода уменьшаются.

Заселенность перекрытия между атомами Na и O с увеличением давления слабо изменяется ($P < 6$ ГПа), при больших давлениях наблюдается уменьшение величин заселенностей областей перекрытия. С другой стороны, заселенность перекрытия между атомами натрия с ростом давления при $P > 10$ ГПа увеличивается; между атомами S и O уменьшается практически по линейному закону.

Список публикаций:

[1] <http://www.crystal.unito.it>.

[2] Murugan R., Ghule A., Chang H., *J. Phys.: Condens. Matter.*, 12, 677-700 (2000).

Акустические исследования суперионного фазового перехода AgI в порах МСМ-41

Великоруссов Петр Викторович

Борис Федорович Борисов, Елена Владимировна Чарная, Евгений Викторович Шевченко

Санкт-Петербургский государственный университет

P.Velikorussov@gmail.com

Фазовые переходы низкоразмерных систем в условиях «ограниченной геометрии» - одна из актуальных проблем физики конденсированного состояния. При исследовании подобных систем акустические методы оказываются весьма оперативными и информативными. Данные о смещении температур фазовых переходов, степени их размытия, обратимый или гистерезисный характер процессов проявляются непосредственно в виде аномалий температурной зависимости скорости прохождения ультразвука. При этом, в отличие от многих других методов, измерения можно проводить в режиме непрерывного сканирования температуры.

В настоящей работе приводятся результаты исследования акустических свойств суперионика AgI в объемных образцах и внедренном AgI в нанопоры молекулярного сита МСМ-41 с разным размером пор. Исследования проведены на продольных УЗВ частотой 3-4 МГц в температурном интервале $20^\circ\text{C} \div 200^\circ\text{C}$, включающем область перехода в суперионное состояние ($147 \div 192^\circ\text{C}$).

Акустические аномалии, обнаруженные в указанном температурном интервале, однозначно связываются с суперионным фазовым переходом и обладают всеми особенностями, характерными для фазовых переходов I-го рода в подобных системах. Кроме того, в данной работе акустическим методом независимо и вполне наглядно подтвержден тот существенный факт, что при первичном нагреве (после долгой выдержки при комнатной температуре) наблюдаемый в AgI суперионный фазовый переход из гексагональной β -фазы в ОЦК α -фазу осложнен наличием примеси низкотемпературной кубической γ -фазы. И только отжиг при $\sim 200^\circ\text{C}$ «стирает» γ -фазу на неопределенно долгое время. Кубическая γ -фаза практически всегда присутствует в исходных образцах AgI при комнатной температуре, и ее характерной особенностью является непредсказуемость поведения в довольно широком температурном интервале.

Моделирование структуры гибридных углеродных фаз

Вотинов Иван Сергеевич

Грешняков Владимир Андреевич

Челябинский государственный университет

Беленков Евгений Анатольевич, д.ф.-м.н.

belenkov@csu.ru

Гибридные углеродные фазы состоят из атомов углерода в различных гибридизированных состояниях. Гибридизированным состояниям sp , sp^2 и sp^3 соответствуют основные аллотропные модификации углерода – карбин, графит и алмаз. Гибридные углеродные фазы могут быть четырех различных классов: sp - sp^2 , sp - sp^3 , sp^2 - sp^3 , sp - sp^2 - sp^3 . Из гибридных фаз наиболее вероятным является существование sp^2 - sp^3 фаз, как фаз состоящих из атомов в состояниях гибридизации наблюдающихся в термодинамически устойчивых аллотропах углерода – графите и алмазе. Некоторые из таких фаз синтезированы экспериментально, например, полимеризованные фуллерены. Закономерности формирования sp^3 - sp^2 фаз слабо изучены. В данной работе

выполнен теоретический анализ закономерностей формирования их структуры, а также расчет гибридных фаз получаемых модельно на основе однослойных углеродных нанотрубок (УНТ).

Модельно получить структуры sp^3 - sp^2 фаз, в которых все позиции sp^3 или sp^2 атомов кристаллографически эквивалентны, можно в результате сшивки или совмещения одинаковых структур предшественников из sp^2 атомов (при этом атомы предшественника должны находиться в одинаковых кристаллографических состояниях). Предшественниками изученных гибридных фаз могут быть углеродные фазы из sp^2 атомов, а также три типа углеродных наноструктур: графеновые слои, однослойные УНТ и фуллереноподобные кластеры. В данной работе модельно исследованы гибридные углеродные фазы, имеющие в качестве наноструктур-предшественников УНТ. Такие фазы называются тубуленановыми. Модельное построение этих структур показало, что всего возможно получить 8 гибридных sp^3 - sp^2 фаз совмещением нанотрубок и 37 фаз сшивкой УНТ. 17 фаз могут быть получены на основе креслообразных УНТ (рис.1.а,б); 28 фаз – из зигзагообразных УНТ (рис.1.в,г).

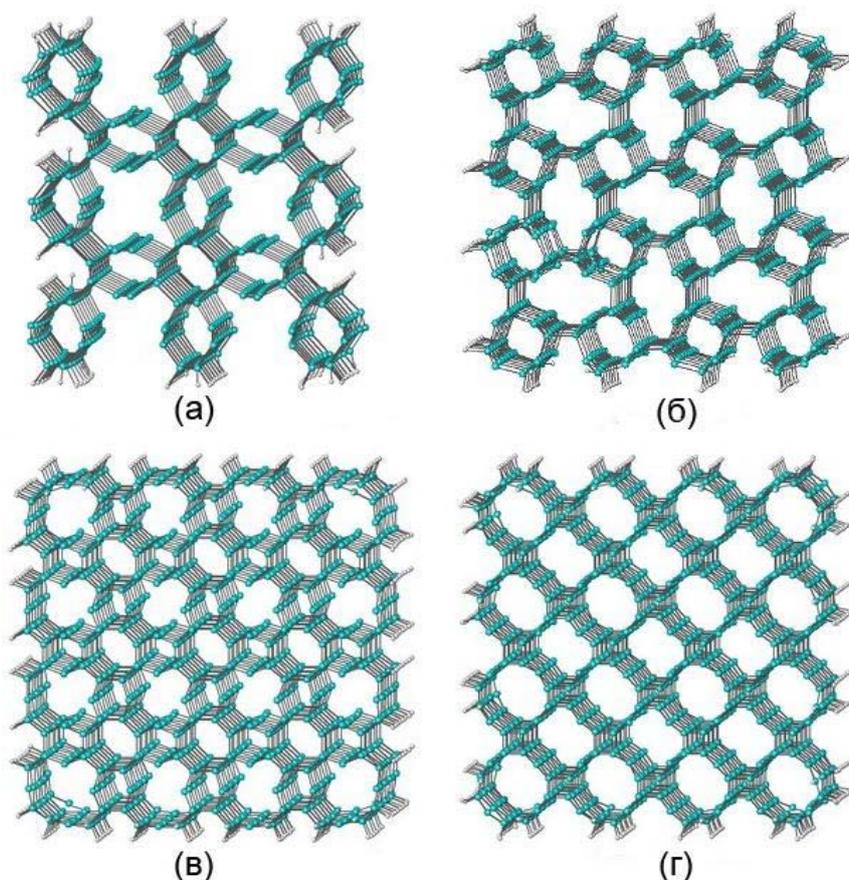


рис. Геометрически оптимизированные структуры тубуленановых фаз:

(а) – $T^{2-3}A1$, (б) – $T^{2-3}A2$, (в) – $T^{2-3}A28$, (г) – $T^{2-3}A29$.

Геометрически оптимизированная структура тубуленановых фаз была рассчитана методом молекулярной механики ММ+. Тубуленановые фазы характеризуются соотношением атомов в состояниях sp^3 к sp^2 гибридизации, которое изменяется в диапазоне от 2:1 до 1:3. Кристаллическая структура изученных фаз может относиться к тетрагональной, гексагональной или ромбической сингонии. Углы между связями у sp^3 гибридизированных атомов тубуленановых фаз находятся в интервале от 60 до 130.72°, для sp^2 атомов – от 108.65 до 126.89°. Длины межатомных связей у sp^3 атомов изменяются от 1.484 до 1.614 Å, длины связей между sp^2 атомами – от 1.325 до 1.406 Å. Расчетные плотности sp^2 - sp^3 фаз лежат в диапазоне значений от 1.72 до 3.24 г/см³. Имеется взаимосвязь между плотностью тубуленановой фазы и диаметром УНТ-предшественника – плотность гибридной фазы уменьшается с увеличением диаметра УНТ. Энергии сублимации, рассчитанные с помощью полуэмпирического квантово-механического метода MNDO, имеют значения от 132.7 до 162.3 ккал/моль. Энергия сублимации увеличивается при стремлении трех углов между связями у sp^2 атома к равновесному значению 120° для графена.

Исследование фазовых превращений в пластически деформированном кобальте

Габдрахманова Лилия Айратовна

Трубкулова Светлана Фанилевна

Башкирский государственный университет

Альмухаметов Рафаил Фазыльевич, д.ф.-м.н.

la-gabdrahmanova@mail.ru

Металлы и сплавы с нанокристаллической структурой представляют большой научный и практический интерес благодаря их уникальным физическим свойствам [1]. С переходом в нанокристаллическое состояние существенно меняются электрические, магнитные, механические и другие свойства. В настоящее время проявление размерных эффектов связывают с возрастанием роли границ между кристаллитами, наличием в структуре неравновесных фаз, пересыщенных твердых растворов, пор и межзеренных сплошностей, избыточной концентрацией дефектов кристаллического строения, наличием остаточных напряжений. Эти факторы обуславливают ряд фазовых и структурных превращений. Несмотря на многочисленные исследования, природа этих процессов изучена недостаточно. В данной работе проводились исследования структурных превращений в нанокристаллическом кобальте. Для перевода в нанокристаллическое состояние образцы подвергали интенсивной пластической деформации кручением на 5 оборотов при нагрузке 50 т. Структурные исследования проводили на рентгеновском дифрактометре ДРОН-7 на $\text{Co K}\alpha$ -излучении. Определение размеров блоков и микронапряжений проводили методом аппроксимаций по уширению дифракционных линий [2].

Результаты наших исследований показали, профиль дифракционной линии исследуемого и эталонного образца хорошо описываются функцией $f(\varphi) = \frac{1}{1 + \alpha\varphi^2}$, где φ - дифракционный угол; α - постоянная.

Полуширину дифракционной линии эталонного образца взяли в качестве инструментального уширения. Тогда физическое уширение β связано с общим уширением дифракционной линии B и инструментальным уширением b соотношением: $\beta = B - b$. Результирующее физическое уширение дифракционной линии β представили в виде суммы уширений за счет вклада размеров блоков и микронапряжений:

$$\beta = \frac{\lambda}{D \cos \theta} + 4\epsilon \operatorname{tg} \theta,$$

где D - размер блоков; λ - длина волны используемого излучения; θ - угловое положение дифракционного максимума; $\epsilon = \frac{\Delta a}{a}$ - величина микронапряжений; Δa - отклонение параметра решетки от среднего значения.

Исследуемые образцы представляли собой пластины диаметром ~ 10 мм и толщиной около 0.3 мм. Рентгенограммы снимали с поверхности образца, перпендикулярной к направлению деформации. Отжиг образцов проводили в муфельной печи в потоке аргона. Температуру измеряли термопарой хромель-алюмель с точностью ± 2 оС. В качестве эталона использовали тот же исследуемый образец, отожженный при 800 оС и охлажденный до комнатной температуры с печью, и порошок кобальта, отожженный при 800 оС в вакууме. При расчетах разделяли вклады $\text{K}\alpha 1$ и $\text{K}\alpha 2$ - линий. Кривые термического расширения измеряли dilatометром, работающим по принципу дифференциального трансформатора.

На кривых термического расширения пластически деформированного кобальта в интервале $T = 20 \div 450$ оС мы обнаружили особенности при температурах $T \sim 100$ °С и $T \sim 170$ °С. Для выяснения природы этих аномалий нами проводились рентгеноструктурные исследования. Результаты исследований показали, что образцы, отожженные при температурах до $T \sim 450$ оС и медленно охлажденные, при комнатной температуре имеют низкотемпературную ГПУ модификацию. Образцы, отожженные при $T = 500$ оС, при комнатной температуре имеет высокотемпературную ГЦК модификацию. Образцы, отожженные при температурах от $T = 500$ оС до $T \sim 900$ оС и медленно охлажденные, содержат низкотемпературную ГПУ модификацию и высокотемпературную ГЦК модификацию. Таким образом, в пластически деформированном кобальте при охлаждении полный переход высокотемпературной ГЦК фазы в низкотемпературную ГПУ фазу не происходит. По нашему мнению это связано с тем, что при пластической деформации происходит уменьшение размеров кристаллитов. С уменьшением размеров кристаллитов энергетически выгоднее существование фазы с более плотной упаковкой. Поэтому в исследуемом образце при температурах ниже температуры фазового превращения ($T \sim 460$ оС) сохраняются кристаллиты высокотемпературной фазы с более плотной ГЦК структурой.

Результаты исследований параметров решетки показали также, что отжиг при 100 оС приводит к заметному уменьшению параметра решетки c , отжиг при температурах $T \sim 170 \div 310$ оС сопровождается ростом параметра c . Параметр a на всем исследуемом интервале температур незначительно уменьшается. Таким

образом, аномалия на кривой термического расширения при $T \sim 100^\circ\text{C}$ обусловлена сжатием кристаллической решетки вдоль оси c , а особенность при температуре $T \sim 170^\circ\text{C}$ - расширением вдоль оси c .

Для уточнения природы наблюдаемых аномалий мы провели исследования влияния температуры и времени отжига на микронапряжения в кристаллической решетке и на размеры блоков. Результаты наших исследований показали, что размеры блоков в исследуемых образцах преимущественно однородны. Отжиг при температуре $T \sim 100^\circ\text{C}$ приводит к уменьшению размеров блоков от 1400Å до $\sim 200\text{Å}$ и к уменьшению микронапряжений от 4×10^{-3} до $\sim 1.5 \times 10^{-3}$. Это согласуется с аномалией на кривой термического расширения при температуре $\sim 100^\circ\text{C}$. Отжиг при $T \sim 170^\circ\text{C}$ приводит к незначительному росту размеров блоков и микронапряжений. Отжиг при температурах от $\sim 170^\circ\text{C}$ до $\sim 450^\circ\text{C}$ сопровождается ростом размеров блоков. После отжига при температуре $T \sim 210^\circ\text{C}$ на зависимости микронапряжений от температуры отжига наблюдается скачкообразный рост. Таким образом, особенности на кривой термического расширения хорошо согласуются с изменениями размеров блоков и микронапряжений при отжиге.

По результатам исследований можно сделать следующие выводы:

- Пластическая деформация кобальта приводит к задержке фазового перехода из высокотемпературной ГЦК модификации в низкотемпературную ГПУ модификацию.
- Особенности на кривой термического расширения обусловлены изменениями размеров блоков при рекристаллизации образца и изменениями микронапряжений.

Список публикаций:

[1] *Р.А. Андриевский, А.В. Рагуля. Наноструктурные материалы. – М.: «Академи», (2005). – 192 с.*

[2] *Уманский Я.С. Рентгенография металлов и полупроводников. – М.: «Металлургия», 1969. - 496 с.*

Кинетика Оствальдовского созревания в системах с конечной объемной долей частиц второй фазы

Гаузин Иван Сергеевич

Челябинский государственный университет

Ягафаров Шакир Шавкатович, к.ф.-м.н.

gauzinis@mail.ru

В 1958 году Лифшиц и Слезов построили теорию, описывающую созревание Оствальдовского типа (коалесценцию) для систем, в которых объемная доля частиц второй фазы стремится к нулю. Реальные системы чаще всего обладают ненулевой объемной долей частиц выпавшей фазы, поэтому часто экспериментальные наблюдения расходятся с предсказаниями теории Лифшица-Слезова. К настоящему времени существует ряд моделей и теорий, описывающих процесс коалесценции в системах с конечным значением объемной доли частиц выпавшей фазы. Они предсказывают, что кубическая зависимость среднего радиуса частиц от времени, предсказанная Лифшицем и Слезовым, сохраняется. Однако в ряде экспериментальных работ наблюдается отклонение в кинетике от кубической зависимости среднего размера частиц при увеличении объемной доли частиц выпавшей фазы, показывая увеличение показателя степени, и, следовательно, замедление роста частиц среднего размера.

Мы смоделировали процесс Оствальдовского созревания в двухфазной системе, представляющей собой частицы второй фазы, расположенные в кубической коробке, матричной фазе. Для случая, когда объемная доля частиц второй фазы стремится к нулю, мы описываем взаимодействие между частицами посредством усредненного поля, предложенного Лифшицем и Слезовым. Частицы, размер которых меньше среднего, отдают атомы растворенного вещества в матрицу, а частицы размером больше среднего потребляют атомы растворенного вещества из матрицы. Таким образом, конкурентная диффузия приводит к растворению мелких частиц и к росту более крупных. Когда объемная доля частиц выпавшей фазы имеет конечное значение и достаточно велика, частицы располагаются близко друг от друга, и приближение усредненного поля теряет смысл. Локальные диффузионные поля частиц при их сближении перекрываются, это позволяет нам рассматривать взаимодействие частиц второй фазы только с частицами из своего ближайшего окружения. При этом мы принимаем, что частицы с размером меньше среднего отдают атомы растворенного вещества частицам из ближайшего окружения независимо от их размера, а частицы с размером больше среднего забирают атомы у частиц из окружения независимо от их размера. Данное условие должно приводить к тому, что частицы с размером меньше среднего могут увеличиваться в размере, а частицы с размером больше среднего уменьшаться, при том что в целом массоперенос продолжает носить направленный характер.

В результате моделирования Оствальдовского созревания при малых значениях объемной доли, когда диффузионное взаимодействие между частицами происходит посредством усредненного поля, мы получили кубическую зависимость среднего радиуса частиц от времени, данный результат согласуется с предсказанием теории Лифшица-Слезова. В случае, когда объемная доля частиц второй фазы имеет конечное значение, и частицы взаимодействуют друг с другом непосредственно, мы получили, что кубическая зависимость среднего радиуса частиц от времени сохраняется, при этом увеличение среднего размера частиц происходит в два раза быстрее, чем в пределе нулевой объемной доли. Полученные нами результаты согласуются с предсказаниями большинства других моделей коалесценции, учитывающих влияние объемной доли на процесс роста зерен, которые описывают направленный массоперенос между частицами от мелких частиц к более крупным. Мы приходим к заключению, что когда массоперенос носит направленный характер, кубическая зависимость среднего размера частиц от времени будет сохраняться независимо от способа описания Оствальдовского созревания в системах с ненулевой объемной долей частиц выпавшей фазы.

Влияние температуры на ΔE -эффект в быстрозакаленных лентах $Fe_{64}Co_{21}B_{15}$

Голыгин Евгений Александрович

Иркутский государственный университет

Татарников Василий Васильевич

Гаврилюк Алексей Александрович, д.ф.-м.н.

egolygin@arbse.net

В работе приведены результаты исследований влияния температуры предварительной термомагнитной обработки и температуры нагрева на полевые зависимости величин ΔE – эффекта и скорости распространения магнитоупругих колебаний в быстрозакаленных металлических лентах состава $Fe_{64}Co_{21}B_{15}$ Магнитострикция насыщения лент $\lambda_S \approx 30 \cdot 10^{-6}$, намагниченность насыщения $MS \approx 1,7 \cdot 10^6 A/m$. Перед проведением исследований образцы в виде узких полосок длиной 0,05 м, шириной 0,001 м и толщиной $25 \cdot 10^{-6}$ м проходили термомагнитную обработку в вакууме 10-3 мм.рт.ст. в интервале температур $\Delta T_{обр} = 2500 - 3500C$ в течение 20 минут. Постоянное магнитное поле, ориентированное перпендикулярно длине образца, составляло 40 кА/м. Целью проведения термомагнитной обработки являлось снятие внутренних закалочных напряжений и наведение в лентах одноосной анизотропии с осью легкого намагничивания, ориентированной перпендикулярно длине образца. Измерение ΔE – эффекта и скорости распространения магнитоупругих колебаний проводилось методом резонанса – антирезонанса [1]. Постоянное магнитное поле смещения H и малое переменное магнитное поле h , возбуждающее магнитоупругие колебания, прикладывались вдоль длины исследуемых полосок. Циклическое изменение температура T нагрева лент в процессе измерения магнитоупругих характеристик проводилось в интервале от 300 до 3000C. В результате проведенных исследований получены следующие результаты.

Установлено, что во всех исследуемых лентах в интервале температур нагрева $T=300 - 2400C$ наблюдается отрицательный ΔE -эффект (т.е. уменьшение модуля упругости с ростом магнитного поля). Рост T сопровождается уменьшением максимального абсолютного значения отрицательного ΔE – эффекта и его смещением в область меньших магнитных полей. Нагрев до температур 2700 - 3000C (рис.1) приводит к возникновению положительного ΔE – эффекта (рост модуля упругости в магнитном поле). При последующем охлаждении до $T = 300C$ в исследуемых лентах наблюдается только положительный ΔE – эффект.

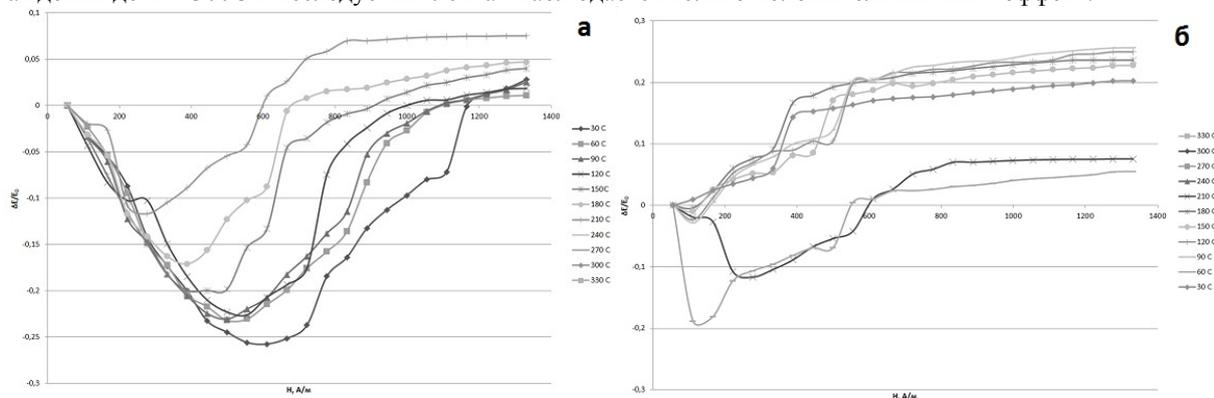


рис.1. Полевая зависимость ΔE -эффекта от температуры образца $Fe_{64}Co_{21}B_{15}$, прошедшего термомагнитную обработку при температуре 250⁰C при нагревании (а), при остывании (б).

Нагрев лент до $T=2100\text{C}$ и последующее охлаждение до $T=300\text{C}$ не приводит к исчезновению отрицательного ΔE -эффекта (рис.2). При этом поле достижения максимума абсолютного значения отрицательного ΔE -эффекта возрастает. Следует отметить, что максимальные абсолютные значения отрицательного ΔE -эффекта достигаются при проведении термомагнитной обработки в интервале температур обработки 2900 – 3100C. На основании проведенных исследований делается вывод о зависимости величины поля наведенной одноосной анизотропии в быстрозакаленных металлических лентах состава $\text{Fe}_{64}\text{Co}_{21}\text{B}_{15}$ от температуры нагрева. Показано, что полевые и температурные зависимости величины ΔE -эффекта могут быть описаны в рамках модели однородного поворота намагниченности с учетом представлений о блох – неелевском изменении структуры доменных границ [2] под действием постоянного магнитного поля.

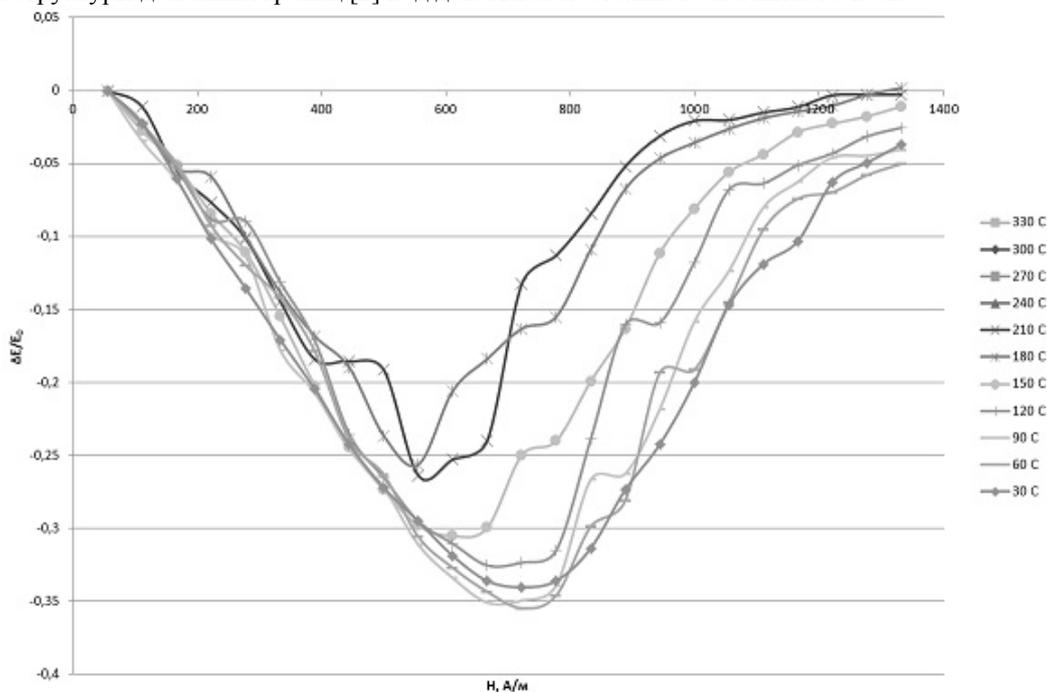


рис.2. Полевая зависимость ΔE -эффекта от температуры образца $\text{Fe}_{64}\text{Co}_{21}\text{B}_{15}$, прошедшего термомагнитную обработку при температуре $330\text{ }^{\circ}\text{C}$ при остывании после предварительного нагрева до $210\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Список публикаций:

[1] Spano M.L. // Journ. Appl. Phys. // 1982. V.53. N.3 P. 2667.

[2] Гаврилюк А.А., Семенов А.Л., Моховиков А.Ю. // ЖТФ. 2006. Т.76. В.6. С.64.

Влияние термомагнитной обработки и температуры нагрева на магнитоупругие свойства быстрозакаленной металлической лент состава $\text{Fe}_{67}\text{Co}_{10}\text{Cr}_3\text{Si}_5\text{B}_{15}$

Гольгин Евгений Александрович

Вотяков Дмитрий Александрович, Татарников Василий Васильевич

Иркутский государственный университет

Семенов Андрей Леонидович, к.ф.-м.н.

egolygin@arbse.net

В работе исследовались температурные зависимости магнитоупругих свойств быстрозакаленных металлических лент (длина 0.05 м, толщина 25 мкм, ширина 0,001 м) состава $\text{Fe}_{67}\text{Co}_{10}\text{Cr}_3\text{Si}_5\text{B}_{15}$, обладающих положительной магнестрикцией. Образцы предварительно проходили термомагнитную обработку в вакууме 10-3 мм.рт.ст. 20 минут, $T_{\text{обр}} = 3300\text{-}4100\text{C}$. Величина приложенного перпендикулярно длине образцов магнитного поля составляла 40 кА/м. Циклическое изменение температуры нагрева лент в процессе измерения магнитоупругих характеристик проводилось в интервале от 300C до 3000C. Также проводились измерения магнитных характеристик индукционным методом при частоте перемагничивающего поля 200Гц. На рис. 1 и 2 приведены полевые зависимости ΔE -эффекта для лент, предварительно обработанных при $T_{\text{обр}} = 3900\text{C}$. Поведение зависимостей аналогично при других температурах обработки образцов.

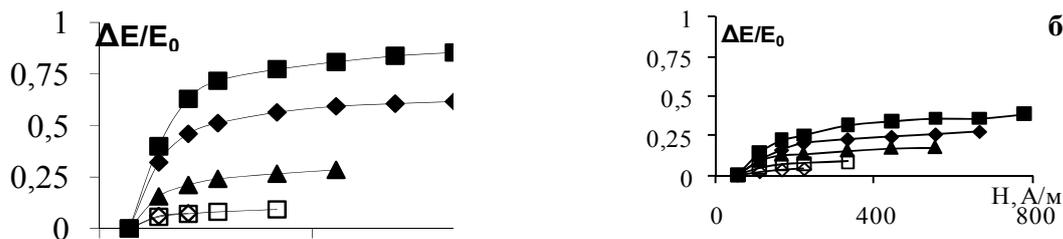


рис.1. Полевые зависимости величины ΔE-эффекта аморфных металлических лент состава $Fe_{67}Co_{10}Cr_3Si_5B_{15}$, прошедших термомагнитную обработку при температуре $T_{обр}=390^{\circ}C$. 1-й цикл “нагрев - охлаждение”. а – нагрев образца, б – охлаждение:

■ – $T=30^{\circ}C$, ◆ – $T=90^{\circ}C$, ▲ – $T=150^{\circ}C$, □ – $T=210^{\circ}C$, ◇ – $T=240^{\circ}C$.

Установлено, что независимо от $T_{обр}$ во всем диапазоне H имеет место только положительный ΔE-эффект. Обычно термомагнитная обработка быстрозакаленных лент приводит к тому, что основным механизмом их намагничивания становится поворот намагниченности, приводящий к уменьшению E [1,2]. Рост температуры термомагнитной обработки от 330° до $410^{\circ}C$ приводит к возрастанию максимального значения ΔE-эффекта. Проведение второго цикла “нагрев-охлаждение” не приводит к заметным изменениям полевых зависимостей ΔE-эффекта (рис.2).

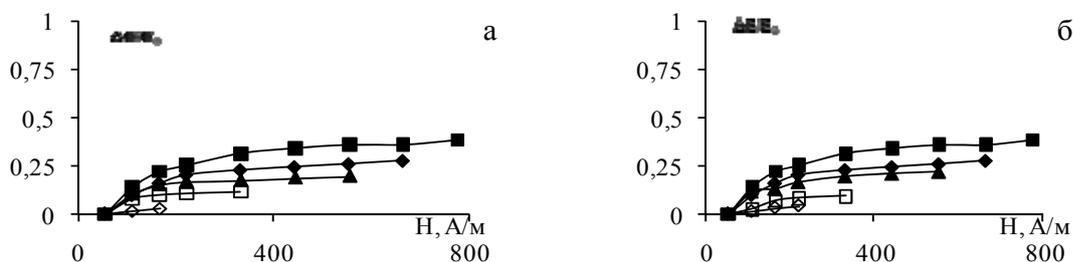


рис.2. Полевые зависимости величины ΔE-эффекта аморфных металлических лент состава $Fe_{67}Co_{10}Cr_3Si_5B_{15}$, прошедших термомагнитную обработку при температуре $T_{обр}=390^{\circ}C$. 2-й цикл “нагрев - охлаждение”. а – нагрев образца, б – охлаждение:

■ – $T=30^{\circ}C$, ◆ – $T=90^{\circ}C$, ▲ – $T=150^{\circ}C$, □ – $T=210^{\circ}C$, ◇ – $T=240^{\circ}C$.

Увеличение температуры предварительно обработки от 3300 до $4100C$ приводит к значительному уменьшению коэрцитивной силы и увеличению остаточной индукции лент (рис.3), что может свидетельствовать о том, что наведенная анизотропия не является однородной: в исследованных лентах имеется значительная угловая дисперсия анизотропии. Рост модуля упругости в относительно малых магнитных полях связан с процессом перестройкой тонкой доменной структуры и реализацией механизма блокировки. Поле блокировки перестройки доменной структуры исследованных лент меньше, чем поле блох – неелевского перехода структуры границ, при котором возникает рост модуля упругости в магнитном поле.

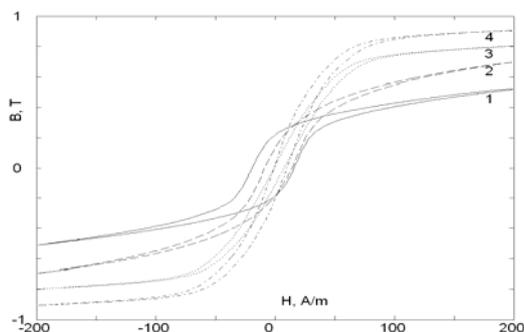


рис.3. Петли гистерезиса образцов аморфных металлических лент состава $Fe_{67}Co_{10}Cr_3Si_5B_{15}$, измеренные при $20^{\circ}C$, прошедших термомагнитную обработку при температурах: 1–без предварительной обработки; 2– $330^{\circ}C$; 3– $390^{\circ}C$; 4– $410^{\circ}C$.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (проект № 11-08-00362 а).

Список публикаций:

[1] Livingston J.D. //Phys. Stat. Sol. (a)// 1982. V. 70. N. 8.

[2]Гаврилюк А.А., Семенов А.Л., Моховиков А.Ю. // ЖТФ. 2006. Т.76. В.6. С.64.

Влияние размера частиц, образующихся при диспергировании некоторых чистых металлов, на удельную энергию этого процесса

Гонне Алексей Владимирович

Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Златоусте

Соколова Наталья Марковна, к.ф.-м.н.

gav74z@yandex.ru

В нашей лаборатории исследования закономерностей механического измельчения вещества абразивом проводятся по специально разработанной методике. Установка снабжена электронным силоизмерительным механизмом, что позволяет определить работу, при которой масса образца уменьшается на единицу и превращается в порошок. Назовём её энергией диспергирования вещества и обозначим a . Исследования позволили установить некоторую зависимость этой величины от характеристик вещества – температуры плавления $T_{пл}$ и молярной массы A - для шестнадцати чистых металлов[1]. Проверка её на четырёх абразивах разной зернистости для семи чистых металлов привела к необходимости ввести в полученное ранее уравнение параметр абразива - l :

$$a = K \frac{T_{пл}}{TA^{2/3}l}, \quad (1)$$

где $K=481\pm 22$ (Дж м/кг^{1/3}моль^{2/3}) - постоянная, одинаковая для всех металлов; T - абсолютная температура испытания; l – максимальный размер абразивного зерна, указанный в паспорте каждого абразива [1]. Измерение среднего размера частиц меди, оставшихся на абразиве, убедили нас, что этот размер равен половине l [2].

Зависимость (1) диктует обратную пропорциональность величины a и l , которая должна оправдываться для каждого из семи исследованных металлов. Коэффициент пропорциональности в $a=f(l)$ индивидуален для каждого вещества и легко может быть найден, а графики, построенные в координатах $a(1/l)$, должны быть прямыми, имеющими разные угловые коэффициенты.

Построение показало, что в исследованной области от $l=30$ мкм до 60 мкм диктуемая (1) зависимость действительно имеет место для всех исследованных металлов. На рисунке 1 приведен пример такой зависимости для никеля.

Экстраполяция линейной зависимости на область малых размеров частиц не возможна: энергия диспергирования при этом становится бесконечно большой. Исследования показали, что уже при $l=20$ мкм (1) нарушается. На рис. 1 соответствующая этому размеру удельная энергия помечена квадратом.

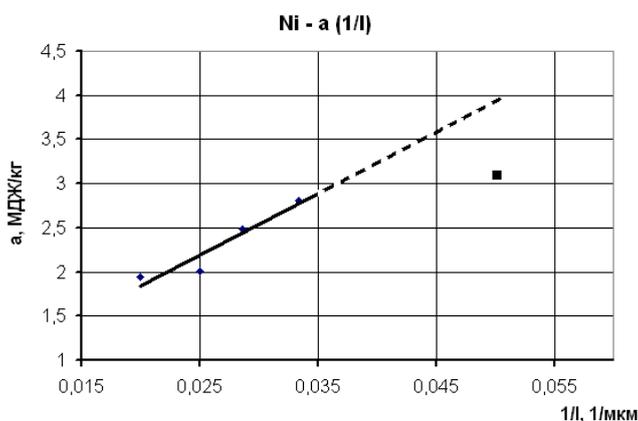


рис.1 Зависимость энергии диспергирования от обратной величины размера образующихся частиц

Более того: судя по (1), зависимость $a(l)$ должна быть гиперболической, уходящей в бесконечность при малых l . Однако построение, выполненное в программе Microsoft Excel 2003, не подтвердило это: экспериментальные точки хорошо укладываются не на гиперболу, а на экспоненту (рис 2). Это имеет место для

всех металлов. Экспоненты пересекают ось ординат каждая в своей, разной для разных металлов, точке. Так, для Cu и Ni значение энергии диспергирования при $l=0$ соответственно равны 3,5 МДж/кг и 4,7 этих же единиц, а для Sn и Cd – 1,0 и 1,6 МДж/кг.

Представляется, что приведенные выше цифры не лишены физического смысла: они дают значения энергии, необходимой для разделения вещества на частицы нулевого размера, предположим - расщепления вещества до атомных размеров. Известно, что для Cu и Ni энергии сублимации равны 5,35 и 7,23 МДж/кг, а для Sn и Cd – 0,777 и 0,941 МДж/кг [3]. Сравнивая эти цифры с приведенными выше, отметим, что энергия сублимации во всех случаях несколько больше, а сравниваемые величины не только близки по значениям, но коррелируют друг с другом.

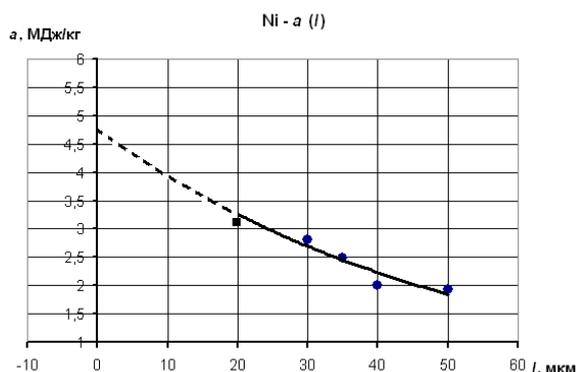


рис.2 Зависимость энергии диспергирования от линейного размера образующихся частиц

Таким образом, были построены зависимости $a(1/l)$ для семи исследуемых металлов; в интервале частиц размером от $l=30$ мкм до $l=60$ мкм. имеет место обратная зависимость энергии диспергирования от среднего размера частиц. Зависимость $a(1/l)$ оказалась экспоненциальной, пересекающей ось $l=0$ для каждого металла в своей точке. Энергии, соответствующие этим точкам, сопоставлены с энергиями сублимации тех же металлов, близки им по значениям и коррелируют с ними.

Список публикаций:

- [1] Н.М. Соколова. Физико-технические характеристики процессов измельчения вещества. Заводская лаборатория. Диагностика материалов, №10, том 76, с.54-57
- [2] Д.Ф. Лапинова. Роль деформационных процессов при механическом измельчении вещества. ВНКФ-17, Материалы конференции, 2010, с. 126-127
- [3] Киттель Ч. Введение в физику твёрдого тела. – М.; Наука, 1978. – 790с

Термодинамические функции кристаллов ThO₂ со структурой флюорита

Григорьева Екатерина Александровна

Кемеровский государственный университет

Федорова Татьяна Петровна, к.ф.-м.н.

Ekkaterinaa@yandex.ru

Твердые электролиты на основе оксидов металлов со структурой флюорита относятся к высокотемпературным электролитам. В твердых растворах на их основе ток создается отрицательными ионами (анионами) кислорода. При комнатной температуре твердые электролиты на основе оксидов металлов проявляют свойства обычного изолятора. При нагреве подвижность анионов увеличивается очень быстро. Данные кристаллы особенно интересны в практическом применении, так как являются материалом для ТВЭЛ (тепловыделяющих элементов) в ядерных реакторах [1]. Одним из таких кристаллов является диоксид тория ThO₂.

Существование суперионной проводимости во многом зависит от структурных особенностей материала. В узлах кристаллической решетки ионных кристаллов находятся заряженные ионы, образующие две подрешетки — катионную и анионную, атомы в которых, совершая колебательные движения, перемещаться по кристаллу не могут, но когда количество ионов оказывается меньше количества узлов, т.е. имеются вакансии (точечные дефекты), многие узлы оказываются свободными, что облегчает вероятность перескока иона из

одного узла в другой. Таким образом, будет интересно рассмотреть свойства ThO₂ с точки зрения динамики решетки.

В работе [2] развит метод исследования особенностей фононных спектров кристаллов, составленных из подрешеток разного типа Браве. Представлены результаты вычислений некоторых термодинамических функций (свободной энергии, внутренней энергии, энтропии, теплоемкости) по известной плотности фононных состояний.

На рис.1-2 представлены результаты расчетов термодинамических функций кристалла ThO₂ со структурой флюорита.

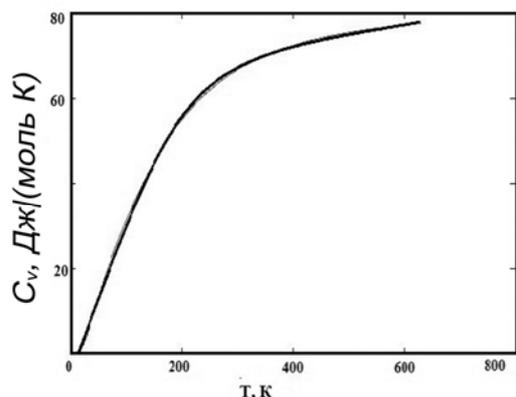


рис. 1. Теплоемкость CV для ThO₂

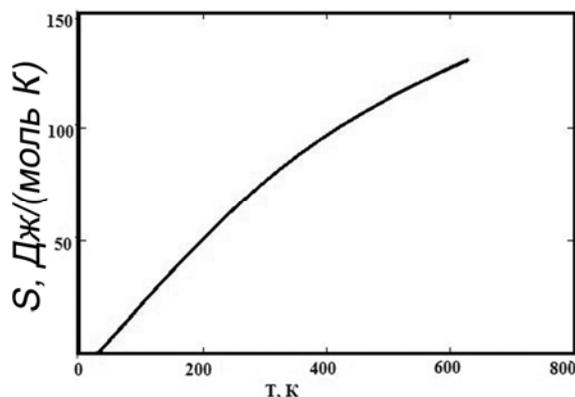


рис. 2. Энтропия S для ThO₂

Полученные результаты неплохо согласуются с экспериментальными данными [3]. Теплоемкость при T = 298 К равна 63 Дж/(моль К), отклонение от экспериментального значения 61,9 Дж/(моль К) [3] составляет 1,8 %. Энтропия при T = 298 К равна 78 Дж/(моль К), что отличается от экспериментального 65,6 Дж/(моль К) [3] на 18,9 %.

Список публикаций:

1. http://en.wikipedia.org/wiki/Nuclear_fuel (Обзорная статья «Ядерное топливо»)
2. Поплавной А.С. Симметрия фононных спектров в кристаллах с подрешетками // Изв. вузов. Физика. 2008. Т. 51.
3. Fischer, D. F. Enthalpy of thorium dioxide to 3400 K / D. F. Fischer, J. K. Fink, L. Leibowitz // J. Nucl. Mat. – 1981. – V. 102. – N 1-2. – P. 220–222.

Особенности контактного плавления в системе свинец-теллур

Дадаев Динислам Хайбулаевич

Максудова Айшат

Дагестанский государственный педагогический университет

dadaeff@mail.ru

При исследовании так называемого контактного плавления (КП) в системе чистых компонентов свинца и теллура (Pb-Te)[1] было обнаружено явление взрывообразного повышения температуры в контакте от эвтектической температуры (326 0С) до температуры свыше 1000 0С. Данный эффект был зафиксирован несколько раз и был записан в цифровом видеоформате. Методика эксперимента представлена в работах [2-4].

Стоит отметить, что данное взрывообразное повышение температуры в этой системе является уникальным явлением, которое наблюдалось нами впервые. И оно наблюдалось нами только в данной системе.

Проведенная видеозапись эксперимента (рис. 1) позволила установить, что в течение 1/24 сек образцы Pb и Te раскаляются добела и происходит полное расплавление веществ.

При образовании любого объема интерметаллида AnBm выделяется количество тепла

$$Q_{\text{выд}} = \left[\frac{\Delta aT + \Delta bT^2}{2} - \frac{\Delta c}{T} + \left(\Delta H^0 - \Delta aT_0 - \frac{T_0^2 \Delta b}{2} + \frac{\Delta c}{T_0} \right) \right] \nu$$

где ν – количество вещества.

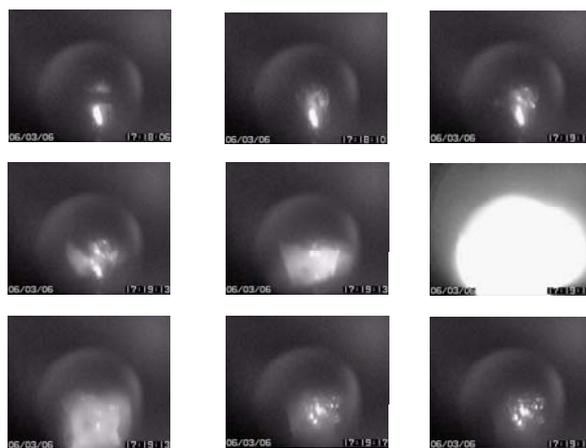


рис.1. Покадровая видеозапись процесса КП системы Pb-Te

Для системы свинец-теллур мы провели расчеты количества тепла, используя термодинамические данные [5,6]. В результате установлено, что в контакте выделяется недостаточно тепла для такой взрывоподобной реакции.

Несоответствие расчетного и экспериментально обнаруженного разогрева контакта объясняется тем, что большая часть интерметаллида образуется путем кристаллизации метастабильной жидкости. Такой механизм обеспечивает более интенсивное образование прослойки по сравнению с реакционной диффузией в твердой фазе, предполагавшейся в расчете. Однако такое объяснение механизма не дает понимания в вопросе появления данного взрывообразного протекания процесса КП.

Список публикаций:

1. Хансен М., Андерко К. Структуры двойных сплавов. Перевод с английского под ред. Новикова И.И и Розельберга И.Л. – М.: ГНТИЛЧМ, 1962. – 1488 с.
2. Дадаев Д.Х., Пацхверова Л.С., Хайрулаев М.Р. Влияние постоянного электрического тока и примесей на процессы контактного плавления в системе свинец-теллур. /Сб. трудов международного симпозиума ОМА-11. Ростов-на-Дону, СКНЦ ВШ ЮФУАПСН, т.2. 2008. С. 242-245.
3. Д. Х. Дадаев, Л. С. Пацхверова, М. Р. Хайрулаев Исследование тепловых эффектов при контактном плавлении системы сурьма – теллур. //ИФЖ, 2009, т.82, №5, с. 1014-1020.
4. Дадаев Д.Х. О: Особенности контактного плавления в системах сурьма-теллур и свинец-теллур: Дисс. канд. физ.-мат наук. – Махачкала, ДГПУ, 2009. – 163 с.
5. Карапетьянц М.Х., Карапетьянц М.Л. Таблицы некоторых термодинамических свойств различных веществ. Труды МХТИ. – М.: 1961. Вып. 34. – 354 с.
6. Barin I., Knacke O. Ternophechemical. Propertiers of Inorganic Substances. Berlin: Springer-Verlag, 1973

Исследование самодиффузии и структурных превращений вблизи малоугловых границ зерен кручения в Ni в условиях одноосной деформации

Дмитриенко Дарья Викторовна

Полетаев Геннадий Михайлович, Старостенков Михаил Дмитриевич

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова

Полетаев Геннадий Михайлович, д.ф.-м.н.

gmpoletaev@mail.ru

В ряде современных технологических операций по обработке металлических материалов давлением (прокатка, ковка, прессование и др.) применяют высокоскоростные режимы деформирования. Диффузионные свойства деформированных металлов и сплавов зависят от величины деформации и скорости деформирования. При этом границы зерен оказывают существенное влияние на диффузию и деформационное поведение поликристаллов, однако механизм влияния деформации на диффузию по различным кристаллографически определенным границам зерен изучен слабо, тем более на атомном уровне. Кроме того, безусловный интерес представляет атомный механизм пластической деформации с участием границ зерен.

Настоящая работа посвящена исследованию методом молекулярной динамики самодиффузии и структурных превращений вблизи малоугловых границ зерен кручения в Ni в условиях одноосной деформации. Граница зерен кручения создавалась в модели в середине расчетного блока путем поворота двух ГЦК

кристаллов на заданный угол разориентации вокруг оси, перпендикулярной границе. Рассматривались три варианта плоскости границы: (100), (110), (111). Получающийся расчетный блок обрезался таким образом, чтобы он приобрел форму параллелепипеда и не содержал по краям пустот. Затем проводилась динамическая релаксация структуры, в ходе которой бикристалл переходил в равновесное состояние. В завершении релаксации выполнялась процедура охлаждения до 0 К. Количество атомов в расчетном блоке составляло около 30000. Шаг интегрирования по времени движения частиц в методе молекулярной динамики варьировался от 1 до 10 фс. Межатомные взаимодействия описывались многочастичным потенциалом Клери-Розато [1]. Параметры потенциала для Ni были взяты из работы [1].

Одноосная деформация задавалась в начале компьютерного эксперимента путем изменения соответствующих межатомных расстояний вдоль одного направления. Рассматривались деформации вдоль осей X (перпендикулярно границе зерен) и Y (вдоль границы). Поскольку наличие свободной поверхности в модели в значительной степени влияет на вероятность образования пластических сдвигов в расчетном блоке, в работе рассматривались два типа граничных условий: жесткие (когда крайним атомам расчетного блока не позволяется двигаться) и комбинированные свободно-жесткие (с наличием у бикристалла свободной поверхности).

Для анализа влияния деформации на интенсивность диффузии по границам кручения (100) и (110) при использовании жестких граничных условий определялись зависимости коэффициента диффузии от величины стартовой деформации. При этом проводились компьютерные эксперименты продолжительностью 200 пс при температуре 1500 К. В большинстве случаев коэффициент самодиффузии увеличивался с ростом величины деформации. Исключением являлась зависимость коэффициента диффузии от деформации бикристалла с границами (100) вдоль оси X (перпендикулярно границе зерен). Причина этого, как было выяснено, заключалась в том, что на вероятность реализации атомных смещений вдоль границы преимущественно влияет избыточное свободное пространство, возникающее при деформации, в плоскости сетки зернограничных винтовых дислокаций.

При использовании комбинированных свободно-жестких условий механизм атомных смещений, возникающих при структурной релаксации бикристаллов, деформированных вдоль Y, был аналогичен механизму при деформации вдоль X: возникали цепочки атомных смещений вдоль ядер винтовых зернограничных дислокаций. Главное отличие заключалось в том, что при деформации вдоль оси X смещения атомов не провоцировались смещениями от свободных поверхностей, а во всех случаях возникали сразу наряду со смещениями атомов от поверхностей.

Таким образом, в результате исследования методом молекулярной динамики структурных превращений вблизи границ кручения было выяснено, что растяжение бикристалла вдоль плоскости границы кручения приводит к интенсификации зернограничной диффузии, обусловленной трансформацией дислокационной сетки. При этом деформация в направлении перпендикулярном границе влияет на диффузию слабее. Пластическая деформация бикристалла на начальном этапе, как правило, сопровождалась образованием атомных смещений вдоль ядер зернограничных винтовых дислокаций, приводящих к трансформации дислокационной сетки.

Список публикаций:

[1] Cleri F., Rosato V. // *Physical Review B*. 1993. V.48. №1. P. 22.

Температурные зависимости времен релаксации ядер ^{13}C в растворах ионных жидкостей

Донцов Сергей Александрович

Санкт-Петербургский государственный университет

Чижик Владимир Иванович, д.ф.-м.н.

dontsov_sergei@nmr.phys.spbu.ru

К настоящему времени широкое распространение получили исследования свойств, методов синтеза и практического использования ионных жидкостей. ИЖ исследуются, как потенциальные растворители в органическом синтезе, как каталитические среды и электролиты, с помощью ИЖ синтезируют новые материалы. Такие качества, как широкая температурная область жидкого состояния, низкая летучесть, термическая устойчивость, малая токсичность, низкая летучесть, высокая ионная проводимость, широкое электрохимическое окно и др. свойственны многим ИЖ, что делает их применение перспективным в различных областях химии и промышленности и определяют значимость ИЖ для “зеленой” химии. ИЖ по структуре - органические соли с температурой плавления ниже 100°C и, как и все соли, образованы ионами, но, по крайней

мере один из составляющих ионов органический, причем катион и анион сильно отличаются по геометрическим характеристикам.

Многие ИЖ имеют способность к самоорганизации в индивидуальном состоянии и в растворах. В частности таким свойством обладают ИЖ на основе 1-алкил-3-метилимидазолия $[C_n\text{mim}]X$ (X -анион).

В данной работе проводилось исследование мицеллообразования ионной жидкости $[C8\text{mim}]Cl$ в водно-дейтериевом растворе. Измерения проводились на спектрометре Varian-AS400, на частоте резонанса ядер ^{13}C 100 МГц, в температурном диапазоне от 25 °С до 75 °С. По данным измерений скорости спин-решеточной релаксации углерода ^{13}C всех компонент спектра установлена зависимость подвижности фрагментов от их положения в молекулярной цепи ИЖ (рис. 2). Показано, что концентрационные зависимости времен релаксации отчетливо отражают точку перехода к формированию ассоциатов (рис. 3).

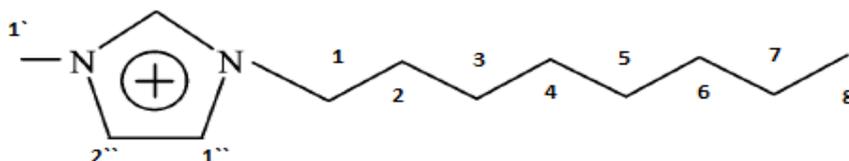


рис.1.Изображение молекулы $[C8\text{mim}]Cl$ с нумерацией ядер углерода.

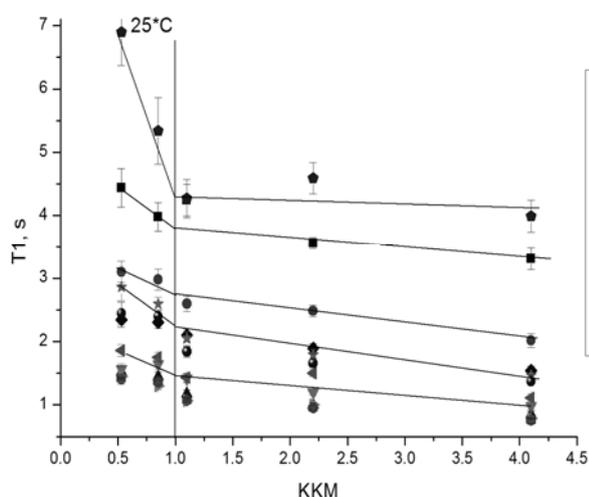


рис.2. Концентрационная зависимость времени T_1 ядер углерода.

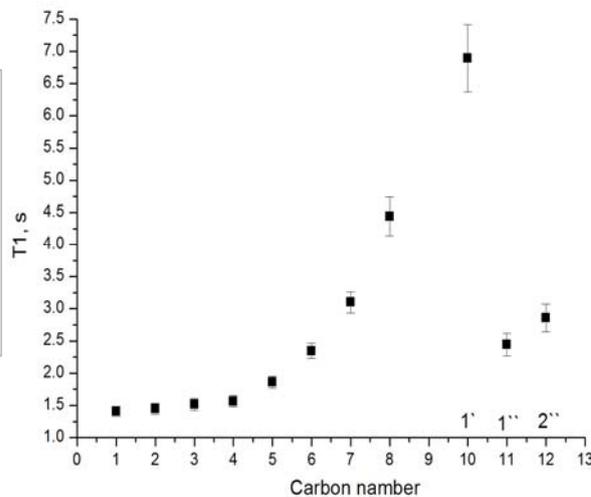


рис.3. зависимость времени T_1 ядер углерода от их положения в молекулярной цепи.

Теоретическое исследование перехода металл-диэлектрик в монооксиде кобальта под давлением

Дьяченко Алексей Александрович

Шориков Алексей Олегович, Лукьянов Алексей Владимирович

Институт физики металлов Уральского отделения РАН

Анисимов Владимир Ильич, д.ф.-м.н.

dyachenko@imp.uran.ru

В некоторых оксидных соединениях переходных металлов под давлением наблюдается переход металл-диэлектрик, сопровождаемый уменьшением магнитного момента [1]. Из экспериментальных данных известно, что в монооксиде кобальта, помимо структурных переходов, при приложении давления происходит переход диэлектрик-металл при 105 ГПа. Экспериментальные измерения XES (X-ray Emission Spectroscopy – эмиссионная спектроскопия) [2, 3] показывают, что высокоспиновое состояние сохраняется вплоть до 140 ГПа, после которого система переходит в низкоспиновое состояние. Интерпретация имеющихся экспериментальных данных позволяет предположить спиновый переход типа $t2g5eg2 \rightarrow t2g6eg1$ [2]. В данной работе использовался метод LDA+DMFT, сочетающий приближение локальной электронной плотности объединенное с теорией динамического среднего поля, который позволяет хорошо описывать Моттовские диэлектрики и системы на грани перехода металл-диэлектрик.

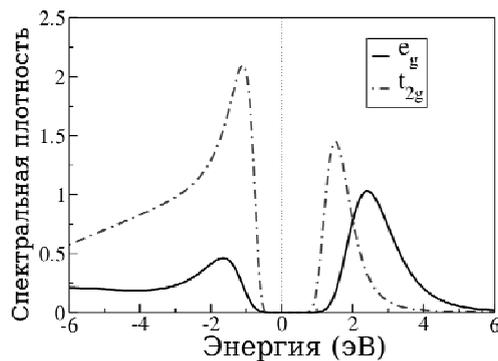


рис.1. Спектральная функция Co-3d t_{2g} и e_g состояний при нормальном давлении (метод LDA+DMFT).

Для расчетов монооксида кобальта методом LDA+DMFT был использован LDA-гамильтониан в базе функций Ванье [4], для O-2p и Co-3d состояний, что необходимо для правильного описания гибридизации O-2p Co-3d состояний. Примесная задача DMFT решалась методом СТ-QMC. Для учета кулоновского взаимодействия в Co-3d, были использованы параметры $U = 6$ эВ и $J = 1$ эВ, полученные в constrain-LDA расчете в базе функций Ванье [4].

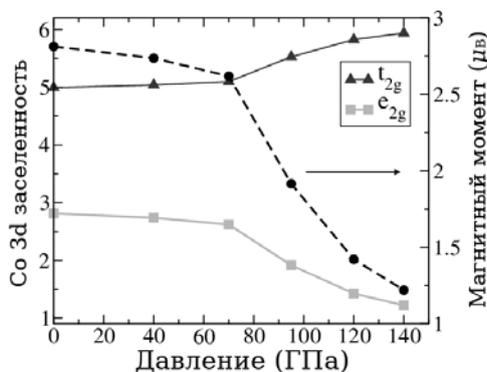


рис.2. Заселенность t_{2g} и e_g состояний кобальта и величина магнитного момента в зависимости от давления.

Основное состояние CoO было рассчитано в кубической структуре B1. Давление учитывалось путем всестороннего сжатия кубической решетки вплоть до 140 ГПа согласно экспериментальным данным[5].

На рис.1 изображена спектральная функция Co-3d состояний, рассчитанная для нормального давления. По результатам расчетов CoO при нормальных условиях является диэлектриком с оптической щелью порядка 2 эВ(экспериментальное значение 2.6 эВ [3]). На рис.2 приведено полученное изменение величины магнитного момента и заселенностей t_{2g} и e_g подзон Co при приложении давления. Из полученных результатов видно, что в интервале давлений 80-100 ГПа наблюдается спиновый переход из высокоспинового ($t_{2g}^5e_g^2$) в низкоспиновое ($t_{2g}^6e_g^1$) состояние: величина магнитного момента уменьшается с 2.61 μ_B при 70 ГПа до 1.91 μ_B при 100 ГПа и резко уменьшается при дальнейшем приложении давления, что согласуется с экспериментальными данными [6, 7].

Таким образом, в ходе вычислений методом LDA+DMFT удалось получить экспериментально наблюдаемый переход диэлектрик-металл в монооксиде кобальта, а также установить, что спиновый переход типа $t_{2g}^5e_g^2 \rightarrow t_{2g}^6e_g^1$.

Данная работа выполнена при частичной поддержке проектов РФФИ 10-02-00046а, 10-02-00546а, МК-3376.2011.2.

Список публикаций:

- [1] Любутин И. С., Гаврилюк А. Г. // УФН. 2009. Т. 179. 1047-1078.
- [2] Rueff J.-P., Mattia A., Badro J., Vank G., and Shukla A. // J. Phys.: Condens. Matter. 2005. V. 17. S717.
- [3] Kurmaev E. Z., Willks R. G., Moewes A., Finkelstein L. D., Shamin S. N., and Kunes J. // Phys. Rev. B. 2008. V. 77. 165127.
- [4] Korotin D. M., Kozhevnikov A. V., Skornyakov S. L., Leonov I., Bingelli N., Anisimov V. I., and Trimarchi G. // The European Physical Journal B — Condensed Matter and Complex Systems. 2008. V. 65. N. 1. pp91-98.
- [5] Guo Q., Mao H.-K., Hu J., Shu J., Hemley R. J. // J. Phys.: Condens. Matter. 2002. V. 14. 11369-11374.
- [6] Yoo C. S. Et al. // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94. 115502.
- [7] Patterson J. R., Aracne C. M., Jackson D. D., Malba V., Weir S. T., Baker P. A., and Vohra Y. K. // Phys. Rev. B. 2004. V. 69. 220101.

Зависимость фазового состава керамических материалов на основе диоксида циркония от концентрации стабилизирующей добавки – оксида иттрия

Жигачев Андрей Олегович

Тамбовский государственный университет имени Г.Р. Державина

Умрихин Алексей Викторович, к.ф.-м.н.

Andreyzhig2009@yandex.ru

Керамические материалы на основе диоксида циркония имеют множество применений: термозащитные покрытия, имплантаты, ионный электролит в твердотельных топливных элементах. В последнее время эти материалы рассматриваются как перспективный элемент для шаровых мельниц тонкого помола. Керамики на основе диоксида циркония обладают рядом полезных качеств: высокие температуры плавления и значительное сопротивление термическому шоку, большие значения сопротивления разрушению и высокая изгибная прочность, твердость, ионная проводимость. Этим свойствам удастся достичь путем оптимизации фазового состава – добавлением к диоксиду циркония стабилизирующих добавок, представляющих собой оксиды алиовалентных металлов, таких как Y_2O_3 , CaO , MgO , CeO_2 .

Исходя из этого, в качестве цели нашей работы мы выбрали определение фазового состава сферических частиц керамических материалов на основе ZrO_2 с добавлением Y_2O_3 .

Содержание Y_2O_3 в керамическом материале варьировалось от 0,36 до 3,16 массовых процентов. Образцы представляли собой деформированные шарики (аспектное соотношение не более 1,5) диаметром от 1,5 до 2 мм. Измерения производились методом рентгеновской дифрактометрии в диапазоне углов 2θ от 20 до 80° на дифрактометре D2 Phaser Bruker AXS. Для компенсации значительного отклонения топологии поверхности образцов от строго планарной в качестве наполнителя применялся химически чистый порошкообразный LiF . Применение в качестве наполнителя измерительной кюветы LiF позволило получить спектры, обладающие большей повторяемостью результатов при расчете по методу Ритвельда. Повышение качества получаемых спектров обусловлено, вероятнее всего, тем, что те части сферического образца, которые расположены под углом к плоскости измерения, оказываются под слоем LiF .

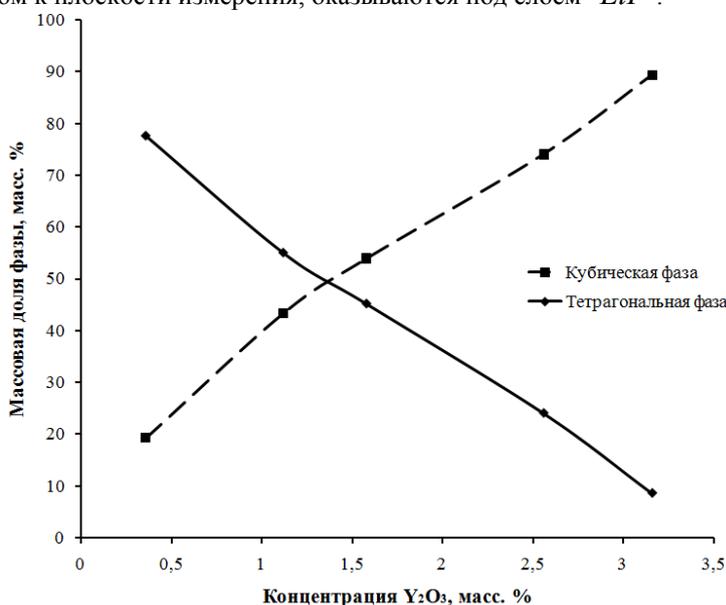


рис 1. Зависимость содержания фаз диоксида циркония от концентрации оксида иттрия

В ходе проведенных нами измерений была качественно подтверждена зависимость содержания кубической и тетрагональных фаз диоксида циркония от концентрации оксида иттрия (рис. 1). Увеличение концентрации оксида иттрия приводило к монотонному увеличению содержания кубической фазы диоксида циркония (согласно литературным данным, при увеличении концентрации алиовалентного оксида более стабильной фазой диоксида циркония становится именно кубическая). Соответственно, происходило уменьшение содержания тетрагональной фазы. Концентрация же моноклинной фазы оставалась примерно постоянной и составляла 1-3% (на рис.1 не показана). При этом погрешность определения содержания фаз по 12 измерениям для каждой концентрации оказалась приблизительно равной 1,5 масс. %. Таким образом, относительная погрешность измерения для кубической и тетрагональной фаз составляла не более 0.05.

Информацию о содержании моноклинной фазы нельзя считать достоверным, так как для нее относительная погрешность была близка к 100% (обусловлено низким содержанием этой фазы).

Таким образом, при определении фазового состава сферических частиц керамических материалов на основе диоксида циркония по предложенной нами методике были получены данные качественно согласующиеся с данными, известными из литературы для порошкообразных керамических материалов.

Научно-исследовательская работа проведена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы, государственного задания на выполнение НИР и грантов РФФИ №11-08-00968-а, №12-08-97551-р_центр_а.

Компьютерное моделирование поверхностных эффектов в планарном массиве атомов кремния методом эмпирических потенциалов

Жигачев Андрей Олегович

Тамбовский государственный университет имени Г.Р. Державина

Умрихин Алексей Викторович, к.ф.-м.н.

Andreyzhig2009@yandex.ru

Часто при исследовании кластеров, состоящих из малого числа атомов ($10^3 - 10^4$) прибегают к компьютерному моделированию, так как изучение поведения систем подобного рода экспериментальным путем затруднительно или невозможно, вследствие технических трудностей, а аналитическое определение параметров систем сопряжено со сложностью решаемых при этом уравнений. Компьютерное моделирование позволяет численно определить некоторые свойства системы, при этом не возникает указанных выше проблем.

В данной работе проводилось изучение поведения планарной системы, состоящей из атомов кремния, методом эмпирических потенциалов. Целью было определение общих закономерностей поверхностных эффектов в таких системах, с созданием возможности обобщения этих закономерностей на более сложные случаи атомных массивов. Моделирование производилось с помощью программы, написанной авторами настоящей работы на Delphi, планарная система была выбрана с целью упрощения процедуры расчета. В нашей модели число атомов варьировалось от 4 до 100. Рассматривалось только парное взаимодействие атомов в отсутствие внешнего возмущения. В качестве потенциала парного взаимодействия был выбран потенциал Морзе (1), хорошо описывающий межатомное взаимодействие с образованием ковалентной неполярной связи.

$$U(r) = D \cdot (1 - e^{\alpha(r-r_0)})^2 \quad (1)$$

В формуле (1): D – энергия связи, $D = 0,9956 \text{ эВ}$; α – параметр, характеризующий жесткость связи в гармоническом приближении, $\alpha = 13,621 \text{ нм}^{-1}$; r_0 – равновесное расстояние, $r_0 = 0,28439 \text{ нм}$. Для потенциала Морзе использовались параметры, полученные в [1]. Временной промежуток, на протяжении которого производилось моделирование поведения системы, составлял 10 пс, единичный временной промежуток – 1 фс. В начальный момент времени атомы покоились в идеальной гексагональной решетке, образуя массив с определенным аспектным соотношением. Моделирование было произведено для набора аспектных соотношений от 1 до 25, с шагом равным 1.

Для упрощения вычисления сил, действующих на атомы, было использовано следующее приближение: при расстояниях между взаимодействующими частицами больших, чем $4 \cdot r_0$ энергия взаимодействия принималась постоянной и равной D . Правомочность такого приближения видна при подстановке в выражение (1) значения $r = 4 \cdot r_0$. Потенциал взаимодействия на расстоянии $r = 4 \cdot r_0$ $U(4 \cdot r_0) = D \cdot (1 - \lambda \cdot 10^{-4}) \approx D$, где величина $\lambda \sim 1$.

В ходе процесса моделирования нами было показано, что массивы атомов трансформируются в образования, близкие по геометрии к кругу (рис.1). Такой процесс можно объяснить уменьшением потенциальной энергии взаимодействия атомов, переходящей в кинетическую энергию их движения.

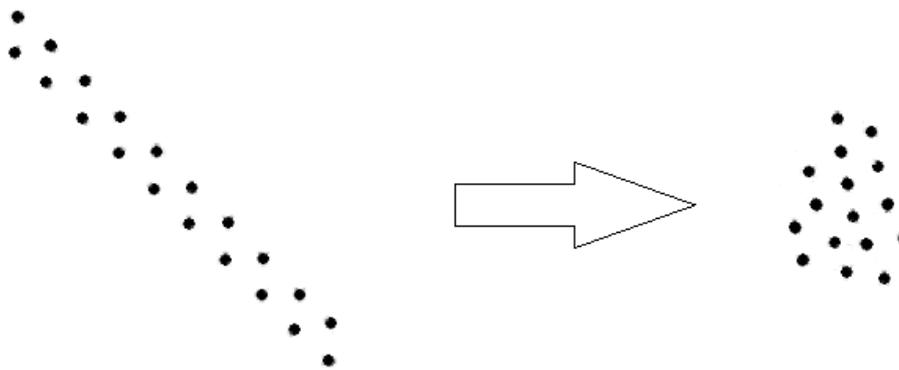


рис. 1 Трансформация группы атомов в образование с меньшим аспектным соотношением

Атомы стремились сформировать плоскую гексагональную решетку, соответствующую минимуму потенциальной энергии. Вместе с тем, в этой решетке возникали дефекты, обусловленные движением атомов (рис. 2).

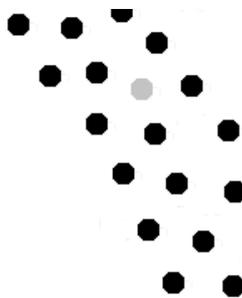


рис. 2 Фрагмент решетки, серым цветом показан точечный дефект – межузельный атом

В ходе работы была определена зависимость доли атомов, покинувших решетку от общего числа атомов. При больших значениях аспектного соотношения эта величина оставалась приблизительно постоянной и равной 0,28 – 0,3. Также, были качественно оценены средние значения кинетической энергии атомов в зависимости от аспектного соотношения. Данная работа может быть полезна для дальнейшего анализа поведения атомных массивов, состоящих из малого числа атомов, в том числе, для характеристики фазовых переходов.

Список публикаций:

[1] N.V. Hung et al. / VNU Journal of Science, Mathematics 126 - Physics 24 (2008) 125-131

Молекулярнодинамическое исследование термодинамических характеристик нанокластеров платины

Замулин Иван Сергеевич

Хакасский государственный университет им. Н. Ф. Катанова

Гафнер Светлана Леонидовна, д.ф.-м.н.

zamulin_ivan@mail.ru

Развитие науки и техники уже в конце прошлого столетия привело к необходимости использования новых устройств, сравнимых по размерам с атомным масштабом. При этом вскоре стало ясно, что свойства наноматериалов, из которых они строятся, в значительной мере зависят от особенностей составляющих их частиц. В связи с этим были начаты интенсивные работы по исследованию малых частиц (кластеров) размером от десятков атомов до нескольких тысяч. Особо актуальным считается изучение металлических наночастиц из-за открывающихся для них широких прикладных возможностей в самых разных областях нанотехнологий, начиная от медицины и заканчивая катализом и энергетикой [1]. Также необходимо отметить, что применение полученных результатов в нанотехнологии может быть отображено и в создании новых устройств, имеющих меньший размер и более экономный процесс работы с точки зрения энергопотребления.

Сейчас основной проблемой при внедрении нанотехнологий в промышленность является не столько само получение новых материалов, сколько воздействие термических эффектов и силовых полей

(радиационных, деформационных и др.) в процессе эксплуатации наноматериалов, что неизбежно ведет к рекристаллизационным, релаксационным, сегрегационным и гомогенизационным процессам, а также к явлениям распада, фазовым превращениям, спеканиям и заплываниям нанопор (нанокапилляров), аморфизации и кристаллизации. Все это должно сказываться на физико-химических, физико-механических и других свойствах, влияя тем самым на эксплуатационные ресурсы наноматериалов. Экспериментальное изучение нанокластеров наталкивается на определенные трудности, связанные в первую очередь с малым размером частиц. Поэтому одним из возможных подходов к исследованию наноразмерных объектов является рассмотрение компьютерных моделей.

В данной работе было проведено компьютерное моделирование процессов плавления и кристаллизации наночастиц платины методом молекулярной динамики с использованием потенциала сильной связи (tight-binding) [2]. При проведении компьютерного анализа в качестве начальных объектов были использованы сферические ГЦК-кластеры платины, получаемые при вырезании сферы из идеальной ГЦК-решетки. Моделирование процессов плавления и кристаллизации осуществлялось в рамках канонического ансамбля, основанного на взаимодействии моделируемой системы с термостатом Нозе [3].

Для исследования термодинамических свойств платины выбирались частицы диаметром от 1,6 до 10 нм при первоначально идеальной ГЦК структуре. С целью разрушения дальнего порядка кластеры платины разного радиуса были плавно нагреты до температуры 1850 К, затем было проведено постепенное охлаждение до температуры 300 К. В результате проведенного исследования наночастиц платины была определена их температура плавления ($T_{пл}$) и кристаллизации ($T_{кр}$). Точки плавления и кристаллизации кластера фиксировались по скачку потенциальной энергии. Замечено возрастание значения температуры плавления (кристаллизации) с увеличением диаметра исследуемого нанокластера. Так, например, для частицы диаметром 2 нм $T_{пл}=1118\text{ К}$ ($T_{кр}=1000\text{ К}$), но уже при диаметре 6 нм температура плавления составляет $T_{пл}=1500\text{ К}$ ($T_{кр}=1099\text{ К}$).

Отмечено сильное уменьшение температуры плавления кластеров платины по отношению к точкам плавления макроскопического образца, которое равно 2042 К. Полученные температуры плавления и кристаллизации различаются, и образуют область гистерезиса температур. Одним из важных наблюдений, которое можно сделать из анализа этой области, заключается в том, что благодаря поверхностному плавлению кластер здесь может находиться в твердожидком состоянии [4].

Температуру плавления нанокластеров также можно определить по наблюдению за изменением теплоемкости системы. В очень узкой температурной области, вблизи точки перехода, будет наблюдаться сильное изменение ее значения. Необходимо отметить, что с увеличением диаметра наночастиц, увеличивались не только значения температуры плавления и кристаллизации, но и значение ее теплоемкости. Например, для нанокластера диаметром 2 нм значение теплоемкости составляло 14,7 эВ/К, а для частицы диаметром 6 нм уже 817,6 эВ/К.

В ходе работы, при разных температурах, рассчитывалась функция радиального распределения $g(r)$, позволяющая проводить анализ структуры моделируемых наночастиц и определить характер фазового перехода. Одной из важной характеристикой эволюции свойств кластера к свойствам массивного материала является значение потенциальной энергии нанокластера, приходящего на один атом. Проведенный компьютерный анализ свидетельствует о значительном понижении потенциальной энергии, приходящейся на атом, с увеличением количества частиц в системе.

Зависимость физических характеристик от размеров кластеров и их неоднозначность ведут еще к одной особенности фазового перехода твердое тело-жидкость, наблюдаемой в наночастицах малого размера [4]. Таким образом, анализ термодинамических величин при фазовом переходе в кластерах позволяет глубже понять природу явления.

Список публикаций:

- [1] С.Л.Гафнер, Л.В.Редель, Ю.Я.Гафнер. Моделирование процессов структурообразования нанокластеров меди в рамках потенциала сильной связи. *ЖЭТФ*, 135, 5, 899 – 916 (2009).
- [2] F. Cleri, V. Rosato. Tight-binding potentials for transition metals and alloys. *Phys. Rev. B.*, 42, 22 (1993).
- [3] S. Nose. A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble. *Mol. Phys.*, 52, 255 (1984).
- [4] С.Л. Гафнер, Ю.Я. Гафнер. Анализ процессов конденсации наночастиц Ni из газовой фазы. *ЖЭТФ*, 13, 4, 833–844 (2008).

Электронная структура и химическая связь в кристалле Ag₂O

Заречина Елена Сергеевна

Кемеровский государственный университет

Кравченко Наталья Георгиевна, к.ф.-м.н.

Elena34056@yandex.ru

В данной работе из первых принципов проведено исследование электронной структуры, а также механизмов образования химической связи в кристалле оксида серебра Ag₂O, который нашел применение в проводящих стеклах AgI-Ag₂O-B₂O, AgI-Ag₂O-V₂O₃ и AgI-Ag₂O-P₂O₅. Исследование характера химической связи между Ag и O позволит лучше понять микроструктуру стекол и механизм ионной проводимости в них.

В Ag₂O кристаллическая решетка относится к простому кубическому типу Бравэ с пространственной группой № 224. Элементарная ячейка содержит 2 формульные единицы, постоянная решетки $a=4.730 \text{ \AA}$ [1]. Структуру Ag₂O можно представить в виде комбинации двух подрешеток: объемноцентрированной кубической (ОЦК) подрешетки кислорода и гранецентрированной кубической (ГЦК) подрешетки серебра, сдвинутые одна относительно другой на $\frac{1}{4}$ пространственной диагонали. При этом пространственные периоды подрешеток вдоль всех осей совпадают с кристаллическими.

Расчет электронной структуры кристалла проводился в рамках теории функционала плотности с обобщенной градиентной аппроксимацией обменно-корреляционных потенциалов Perdew-Burke-Ernzerhof, (PBESOL GGA), программным кодом CRYSTAL 09 [2] с использованием базисов для Ag: (1s)2(2s)2(2p)6(3s)2(3p)6(3d)10(4s)2(4p)6(4d)10(5sp)1(6sp)0, O:(1s)2(2sp)6(3sp)0. Полученная в результате оптимизации геометрии постоянная решетки a составляет 4.620 \AA , что находится в хорошем согласии с экспериментом [1]. Расчет зонной структуры проводился в точках на линии $\Gamma(0,0,0) - X(0,1/2,0) - R(1/2,1/2,1/2) - \Gamma(0,0,0) - M(1/2,1/2,0) - X(0,1/2,0)$.

На рис. 1 представлена зонная структура, а также полная и парциальные плотности состояний. За нуль энергии принято последнее заполненное состояние. Из расчета видно, что данный кристалл является прямозонным, полученная в результате расчета ширина запрещенной зоны (в точке Γ) составляет 0.30 эВ , что меньше экспериментально определенной (1.3 эВ) в [3], данное обстоятельство является известной проблемой теории функционала плотности.

Всю валентную зону можно разбить на 3 части. Нижняя связка зон является узкой малодисперсной, расположена в области -19 эВ . Из анализа парциальной плотности состояний (рис. 2) видно, что в формировании зоны участвуют 2s - состояния кислорода. В полной плотности состояний этой связке зон соответствует двойной пик. Верхнюю валентную зону (ВВЗ) шириной 7.6 эВ можно разбить на 2 области. Нижняя часть ВВЗ образована 6 зонами и имеет ширину 2.7 эВ . Она расположена в области -6 эВ , образована в основном 2p-состояниями кислорода, с заметным вкладом d – состояний серебра. В плотности состояний этой полосе отвечают 2 пика, расположенные в области 7.2 и 5.6 эВ . Как показывает парциальная плотность состояний, далее следует часть ВВЗ, образованная в основном 3d-состояниями меди. Ее ширина составляет около 2 эВ , в плотности состояний ей соответствует пик с центром тяжести, приходящимся на -3.6 эВ (согласно данным, полученным с помощью рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии [3], -3.9 эВ). Верхняя часть ВВЗ имеет анион - катионную природу.

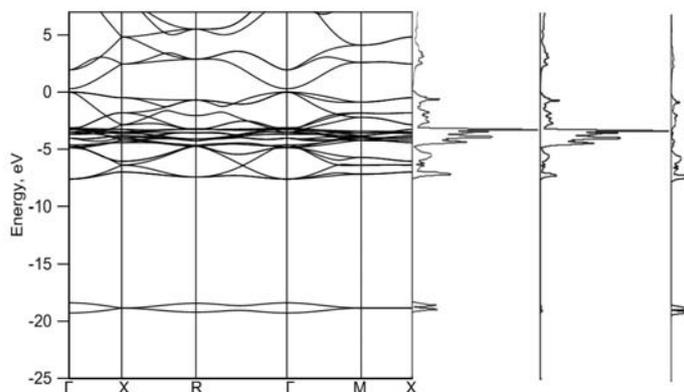


рис. 1. Зонная структура, полная и парциальные плотности состояний кристалла Ag₂O

На рис. 2 приведено распределение полной кристаллической $\rho(\vec{r})$ и деформационной $\Delta\rho(\vec{r})$ плотностей. Численные значения приводятся в единицах $e/\text{\AA}^3$. Из распределения $\rho(\vec{r})$ видно, что максимум на связи Ag – O отсутствует, однако существуют общие контуры, охватывающие «цепочки» из атомов серебра и кислорода.

Таким образом, наряду с ионной имеется некоторая доля ковалентной составляющей химической связи Ag-O. На карте деформационной плотности сплошные линии отвечают положительным значениям деформационной плотности, штриховые – отрицательным. Видно, что в кристалле происходит существенное перераспределение электронной плотности. Имеет место натекание заряда в область атомов кислорода, с небольшими максимумами на линии связи Ag-O, а также вытекание из области, прилежащей к атомам серебра. Кроме того, вблизи ядра металла происходит перестройка d – оболочек металла, что приводит к внутриатомному переток $4d^{10}s^1 - 4d^9s^1$.

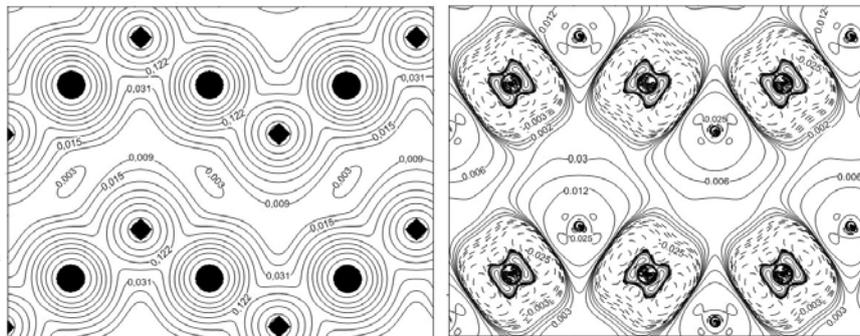


рис. 2. Распределение полной кристаллической и деформационной плотности в кристалле Ag_2O

Список публикаций:

- [1] Norby. P., Dinnebier. R.E., Fitch. A.N. Decomposition of silver carbonate: the crystal structure of two high-temperature modifications of Ag_2CO_3 // *Inorganic Chemistry* – 2002. - 41(14) – P. 3628-3637
 [2] Gonze X. et. al. A brief introduction to the ABINIT software package. // *Z. Kristallogr.* – 2005. – 220. – P. 558-562.
 [3] L. H. Tjeng, M. B. J. Meinders, J. van Elp, J. Ghijsen, G. A. Sawatzky and R. L. Johnson, *Phys. Rev. B* 41,3190 (1990).

Исследование структурных, электронных и механических свойств Li_2O из первых принципов

Зырянов Виктор Юрьевич

Кемеровский государственный университет

Журавлев Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.

zyu69@mail.ru

Первопринципными методами проведены исследования равновесной структуры оксида лития и сопоставлены с известными экспериментальными и теоретическими данными. Выполнены расчеты зонной структуры, и плотности электронных состояний Li_2O с помощью пакета CRYSTAL06 [1]; путем анализа вычисленных распределений валентной и разностных плотностей исследованы механизмы образования химической связи и результаты механических свойств.

В теории функционала плотности ключевым является выбор формы аппроксимации обменно-корреляционной энергии, которая является функционалом электронной спиновой плотности $\rho\uparrow(r)$ и $\rho\downarrow(r)$. Наиболее популярными функционалами являются приближения локально спиновой плотности (LSD) и обобщенной градиентной аппроксимации (GGA). Приближения локальной плотности с Dirac-Slater обменом и Perdew-Zunger в дальнейшем будем именовать LDA PZ [2], а градиентное приближение к обмену и корреляции в варианте GGA, предложенное Perdew и Wang в [3] - PWGGA. С гибридным потенциалом B3LYP используется градиентная коррекция корреляционного потенциала по Perdew и Wang (B3PW), а также в форме Lee-Yang-Parr [4,5].

Для выбора оптимального сочетания метода расчета и базисного набора использовалась процедура оптимизации геометрии кристаллических решеток по условиям минимума полной энергии и сил, действующих на атомы, с последующим сопоставлением с известными экспериментальными данными. Для лития использовались базисы [5]: Li_61-1G_, Li_6-11G_, Li_5-11G*__, Li_6-1G_. Для атомов кислорода базисы [6] O_8-411d11G_, O_8-411d1_. Точность вычислений $10 - 8$ а. е. Наиболее точный результат параметра постоянной решетки можно получить используя метод LDA (PZ) (ошибка от экспериментального значения составляет 0,9 %), который является лучшим среди методов LDA, методы LDA (VBH) и LDA(VWN) занижают значение параметра (ошибки от эксперимента составляют 1 %), а для методов GGA лучшим является метод PWGGA (PWGGA) (0,9 %), методы BECKE (PBE) в целом завышает значение параметра (0,9 %). Гибридный потенциал B3LYP (0,6 %) позволяет получить наиболее точный результат при использовании данных базисов.

Методом линейной комбинации атомных орбиталей с градиентной аппроксимацией обменно-корреляционного функционала электронной плотности программным кодом CRYSTAL06 [1] путем оптимизации геометрии кристаллической решетки Li₂O вычислены параметры элементарной ячейки.

Кроме того сравнение результатов для определения постоянной решетки позволяет говорить, что предпочтительнее использовать базис (Li_61G_dovesi_1984; O_8-411d1_bredow_2006) (ошибки от эксперимента для метода LDA (PZ) — 0,6 %). Для методов LDA (PZ), PWGGA (PWGGA) и B3LYP этот базис лучше. В работе проведены расчеты параметров зонной структуры Li₂O. На рис. 1 приведены зонная структура и плотность состояний оксида лития методами PWGGA. Вершина валентной зоны реализуется в точке Г, тогда как дно зоны проводимости в точке X. Нижняя валентная зона образована s-состояниями кислорода (s-зона), а верхняя валентная зона p-состояниями.

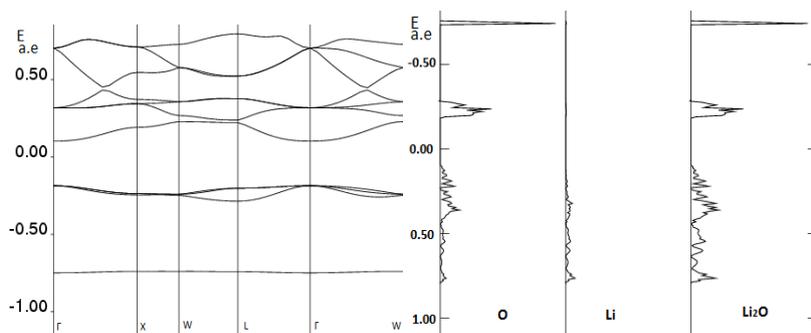


рис.1. Зонная структура и плотность состояний $N(E)$ Li₂O (метод PWGGA)

На рис.2 приведена карта распределения валентной электронной плотности оксида лития. В валентной электронной плотности минимальное ее значение приходится на позиции атомов катиона (литий), а максимумы сосредоточены на анионах кислорода и в междоузельном пространстве.

Из зависимостей полной энергии от деформаций вычислены модуль всестороннего сжатия и упругие постоянные C_{ij} ($C_{11}=373,8$ ГПа, $C_{12} = 80,5$ ГПа, $C_{44}=135,8$ ГПа, $B_0=178,2$ ГПа). Теоретические данные были аппроксимированы уравнением Берча-Мурнагана:

$$p = \frac{3}{2} B_0 \left(x^{-\frac{7}{3}} - x^{-\frac{5}{3}} \right) \left[1 + \frac{3}{4} (B' - 4) \left(x^{-\frac{2}{3}} - 1 \right) \right], \quad (1)$$

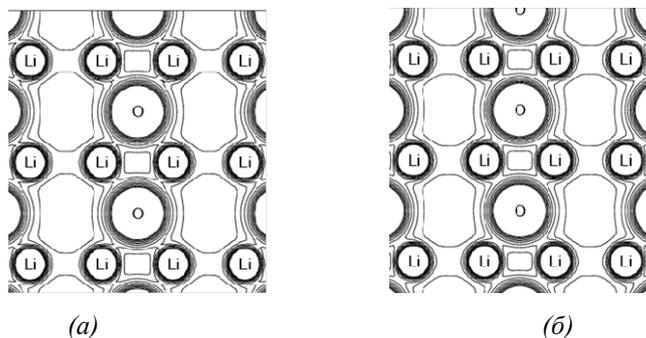


рис.2. Распределение валентной электронной плотности Li₂O по методам PWGGA (а) и LDA (PZ)(б)

где $x=(V/V_0)$ – относительное изменение объема, V_0 – объем элементарной ячейки при $p=0$, B_0 и B' – эмпирические параметры, имеющие смысл модуля всестороннего сжатия в состоянии равновесия и его первой производной по давлению. Рассчитаны эффективные заряды атомов и заселенности перекрытия их с ближайшими соседями, а также карты распределения деформационной плотности.

Список публикаций:

- [1] CRYSTAL06 User's Manual /Dovesi R., Saunders V.R., Roetti C et al. // University of Torino, Torino, 2006.
- [2] Perdew, J. P., Zunger, A. // Phys. Rev. B.-1986. – 33. – P. 8800–8802.
- [3] Perdew, J. P., Wang, Y. // Phys. Rev. B.-1992. – 45. – P. 13244–13248.
- [4] Becke, A. D. // Phys. Rev. B.-1988. – 38. – P. 3098–3100.
- [5] Lee, C., Yang, W., Parr, R. G. // Phys. Rev. B.-1988. – 37. – P. 785–789.
- [6] Интернет-ресурс www.crystal.unito.it/Basis_Sets/ptable.html

Релаксация модуля сдвига металлического стекла $Zr_{46}(Cu_{4/5}Ag_{1/5})_{46}Al_8$ вблизи температуры стеклования при разных скоростях нагрева

Изотова Галина Владимировна

Митрофанов Юрий Петрович

Воронежский государственный педагогический университет

Хоник Виталий Александрович, д.ф.-м.н.

galina3028@yandex.ru

Явление структурной релаксации приводит к значительному изменению физических свойств металлических стекол. В частности, оно оказывает существенное влияние на их упругие свойства. Так, в результате структурной релаксации, упругие модули могут увеличиваться на несколько процентов [1]. Причем, из всех упругих модулей металлических стекол чрезвычайно чувствительным к структурной релаксации является модуль сдвига G [2]. Ранее были проведены исследования для металлического стекла Pd40Cu30Ni10P20, которые показали, что ниже калориметрической температуры стеклования T_g структурная релаксация приводит к росту модуля сдвига [2, 3], а выше T_g – к его падению [4, 5]. В работе [5] исследовалась релаксация модуля сдвига при разных скоростях нагрева. Представляет интерес изучение релаксации G при разных скоростях нагрева для металлического стекла другого химического состава. Для стекла $Zr_{46}(Cu_{4/5}Ag_{1/5})_{46}Al_8$ известно [6], что ниже T_g структурная релаксация приводит, как и в случае стекла Pd40Cu30Ni10P20, к росту G . С учетом вышеизложенного, в данной работе поставлена цель – исследовать релаксацию модуля сдвига в металлическом стекле $Zr_{46}(Cu_{4/5}Ag_{1/5})_{46}Al_8$ при разных скоростях нагрева.

Для достижения цели были проведены исследования релаксации высокочастотного модуля сдвига G при нагреве стекла со скоростями 0.75, 1.25, 2.5 и 7.5 К/мин. Частота f резонансных сдвиговых колебаний составляла около 640 кГц. Измерения проводились *in situ* [2], т.е. непосредственно в процессе термообработки, используя методику бесконтактного электромагнитно-акустического преобразования. Из экспериментально полученной температурной зависимости резонансной частоты сдвиговых колебаний рассчитывалось относительное изменение модуля сдвига [2, 3]: $g = f^2 / f_0^2 - 1$, где f – текущая частота колебаний, f_0 – начальное значение частоты. Температура стеклования T_g и температура кристаллизации T_c определялись с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии.

В результате исследования установлено следующее. При $T < 410$ К величина модуля сдвига G не зависит от скорости нагрева (рис.1). Откуда следует, что в этом случае снижение G с температурой обусловлено только ангармонизмом атомных колебаний. При дальнейшем нагреве, т.е. для $410 \text{ К} < T < T_g$, величина модуля G зависит от скорости нагрева, при этом G растет относительно ангармонической компоненты (рис.1).

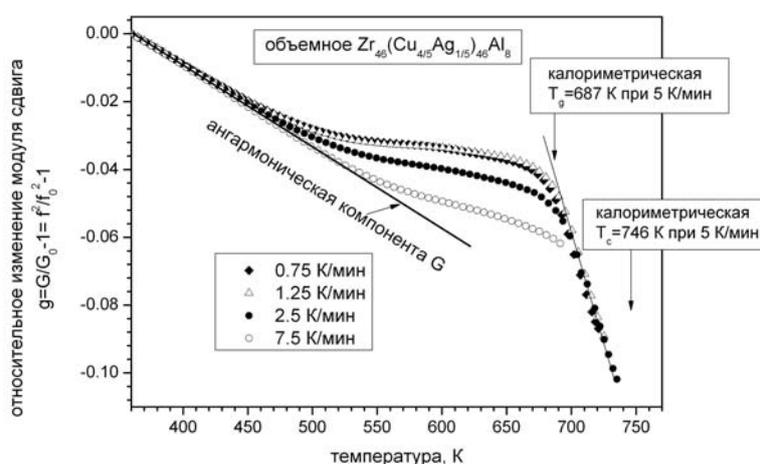


рис.1. Температурная зависимость относительного изменения модуля сдвига объемного металлического стекла $Zr_{46}(Cu_{4/5}Ag_{1/5})_{46}Al_8$ при разных скоростях нагрева, где T_g – калориметрическая температура стеклования, T_c – калориметрическая температура кристаллизации.

Установлено, что степень релаксации (роста) G относительно ангармонической компоненты увеличивается с уменьшением T . Такая кинетика G обусловлена процессами структурной релаксации, ее особенностями протекания [7]. Выше калориметрической температуры стеклования T_g ($T_g = 687$ К при $\dot{T} = 5$ К/мин [8]) величина модуля G не зависит от скорости нагрева. Вблизи T_g кривые $G(T)$ испытывают значительный излом так, что угол наклона G увеличивается в среднем в 20 раз. Излом G свидетельствует о переходе стекла в метастабильное переохлажденное жидкое состояние. Отметим, что выше T_g для $\text{Pd}_{40}\text{Cu}_{30}\text{Ni}_{10}\text{P}_{20}$ величина модуля сдвига зависит от скорости нагрева [5], отражая большие (около 500 – 1100 с) времена релаксации структуры метастабильной жидкости [4]. Отсутствие зависимости модуля сдвига от скорости нагрева выше T_g для исследуемого стекла косвенно указывает на малые времена релаксации структуры переохлажденной жидкости. Другими словами, структура метастабильной жидкости успевает отслеживать изменение температуры так, что зависимость модуля сдвига от скорости нагрева отсутствует.

Список публикаций:

- [1] Митрофанов Ю.П. Релаксация высокочастотного модуля сдвига в объемных металлических стеклах на основе Pd-Cu-P (дисс. канд. физ.-мат. наук), Воронеж (2010).
 [2] Митрофанов Ю.П., Хоник В.А., Васильев А.Н., ЖЭТФ, 135, № 5, 951-957 (2009).
 [3] Khonik V.A., Mitrofanov Yu.P., Lyakhov S.A., Khoviv D.A., Konchakov R.A., J. App. Phys, 105, 123521 (2009).
 [4] Khonik V.A., Mitrofanov Yu.P., Khonik S.V., Saltykov S.N., J. Non-Cryst. Sol., 356, 1191-1193 (2010).
 [5] Mitrofanov Yu.P., Khonik V.A., Granato A.V., Joncich D.M., Khonik S.V., J. App. Phys, 109, 073518 (2011).
 [6] Митрофанов Ю.П. Кинетика структурной релаксации объемных металлических стекол системы Zr-(Cu, Ag)-Al по данным измерения высокочастотного модуля сдвига, ФАГРАН (конференция), Воронеж, (2010).
 [7] Khonik V.A., Ohta M., Phys. Stat. Sol. (a) 184, № 2, 367-372 (2001).
 [8] Afonin G.V., Khonik S.V., Konchakov R.A., Mitrofanov Yu.P., Kobelev N.P., Podurets K.M., Tsyplakov A.N., Kaverin L.D., Khonik V.A., Intermetallics, 19, 1298-1305 (2011).

Механические свойства хлорида серебра

Киселева Елена Александровна

Кемеровский государственный университет

Журавлев Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.

Lenok_matem@mail.ru

Хлорид серебра относится к структурному типу каменной соли (NaCl). Соединения серебра находят широкое практическое применение. Галогениды являются уникальными материалами для фотографических процессов. Они же используются в твердых электролитах. Несмотря на множество экспериментальных исследований свойств соединения AgCl, теоретические исследования важных свойств практически отсутствуют. Поэтому теоретическое изучение механических свойств хлорида серебра является актуальным.

В настоящей работе для кристалла AgCl выполнены расчеты из первых принципов упругих постоянных, коэффициентов сжимаемости и модулей объемной упругости. Расчеты выполнялись с применением программного пакета CRYSTAL06 [1] в рамках приближения Хартри-Фока и теории функционала плотности (ТФП) с различными видами обменно-корреляционных потенциалов. В качестве базиса применялась блоховская сумма локализованных s-, p-, d- атомных орбиталей (АО) гауссова типа. В ТФП - вычислениях использовались приближения локальной плотности с локальным обменом и Perdew-Zunger корреляцией (LDA PZ), а также градиентное приближение к обмену и корреляции PWGGA и VBH. При вычислениях гибридным методом в рамках ХФ-обмена применялась градиентная коррекция корреляционного потенциала в форме B3LYP и B3PW. Базисные наборы функций для расчетов взяты следующие: Ag_HAYWSC-2111d31G, Cl_86-311G, Ag_All_Electron, Ag_extended_ruiz_2003.[2].

Полученные значения постоянной решетки a имеет наилучшее согласие для обменно-корреляционного потенциала LDA PZ и составил 5,530 Å (эксперимент - 5,539 Å) в базисе Ag_extended_ruiz_2003; Cl_86-311G.

В таблице приводятся результаты вычислений упругих постоянных хлорида серебра в сравнении с экспериментальными значениями для метода PWGGA и базиса Ag_HAYWSC-2111d31G; Cl_86-311G ($a=5,698\text{Å}$ [3])

показатель	расчет	Эксперимент	Ошибка, %
$C_{11}, ГПа$	68,4	59,7[4]	14,6
$C_{12}, ГПа$	28,2	36,5[4]	22,7
$C_{44}, ГПа$	6,2	6,18[4]	0,3
$C_{11}^/, ГПа$	54,5	54,2[4]	0,6
$B_s, ГПа$	42,1	44,3[4]	5,0
$B, ГПа$	41,6	44,0 [5]	5,5
$E, ГПа$	28,2	20,0[5]	41,0
$G_v, ГПа$	11,7	7,1[5]	64,8
$G_h, ГПа$	10,1		42,3
$G_r, ГПа$	8,6		21,1

(B – объемный модуль, G – модуль сдвига (v) – Фойга, (h) – Хила, (r) – Реуса), E – модуль Юнга)

Из таблицы видно, что вычисленные упругие постоянные C_{44} , $C_{11}^/$ имеют ошибку от экспериментальных значений меньше 1 %.

Результаты вычислений упругих модулей поликристаллов, а именно модуль Юнга и модуль сдвига находятся не в очень хорошем согласии с экспериментальными значениями, хотя модуль сдвига по Реусу имеет наименьшую погрешность (21,1 %) в сравнении с модулями сдвига по Фойгу (64,8 %) и Хиллу (42,3 %). Результат объемного модуля упругости имеет небольшую ошибку от экспериментального значения (5,5 %). Подобные таблицы результатов получены и для AgBr.

Таким образом, выполненные впервые расчеты из первых принципов, показывают, что методы теории функционала плотности удовлетворительно описывают механические свойства галогенидов серебра.

Список публикаций:

- [1] Dovesi R., Saunders V.R., Roetti C. et al, CRYSTAL06 User,s Manual, 258 (2006).
[2] Интернет-ресурс http://crystal.unito.it/Basis_Sets/ptable.html
[3] Victora, R. H. // Phys. Rev. B, 56, № 8, (1997), pp.4417-4421
[4] W. C. Hughes and L. S. Cain Department of Physics, Davidson College // North Carolina 28036 Received 21(1994)
[5] Интернет-ресурс <http://www.crystran.co.uk/silver-chloride-agcl.htm>

Исследование углеродных автокатодов методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии

Кислов Евгений Александрович

Комарский Александр Александрович, Скоморохов Денис Сергеевич, Чепусов Александр Сергеевич

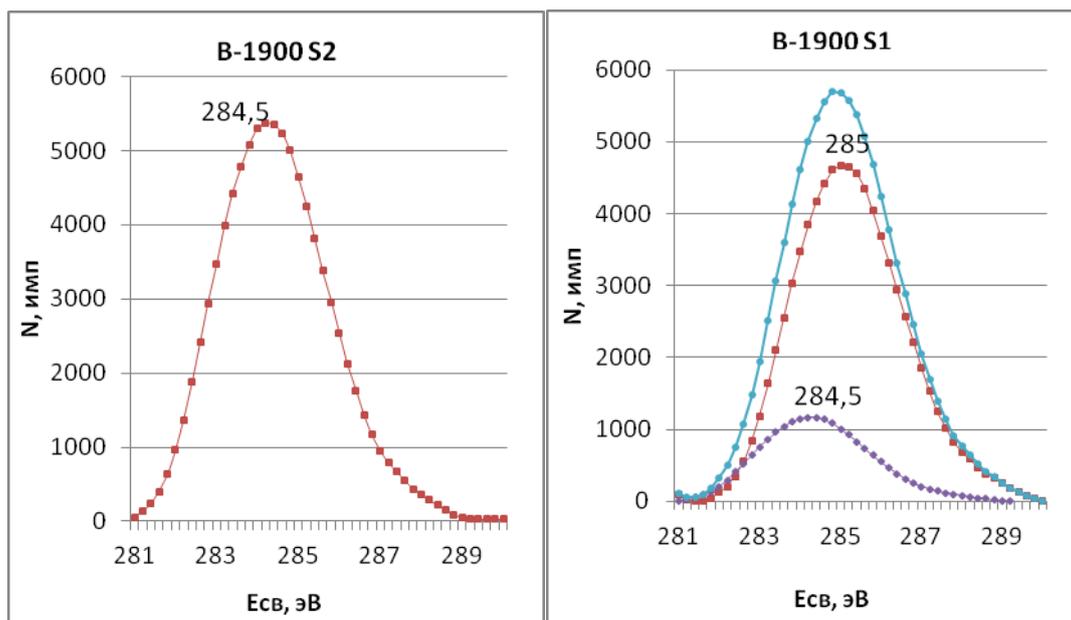
Институт электрофизики УрО РАН

Кузнецов Вадим Львович - д.т.н.

keaman@yandex.ru

Методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии исследована электронная структура искусственных углеродных материалов, применяемых в качестве автоэмиссионных катодов (АК).

Цель исследования - найти отличия в электронной структуре рабочей и нерабочей поверхности образца. Участвовавшая в автоэмиссии сторона обозначена «s1», обратная сторона – «s2». В результате проведенных исследований получены спектры образцов В1300, В1500, В1900. Анализ особенностей линии C_{1s} показывает изменение типа гибридизации исходного материала. Это изменение подтверждается тремя характерными спектральными особенностями. Первой является изменение индекса асимметрии линий остовных уровней спектра рабочей стороны АК. На рис. 1 приведены спектры C_{1s} рабочей и нерабочей сторон. Линия C_{1s} рабочей стороны, имеющая больший индекс асимметрии (0,28), состоит из двух спектральных составляющих с энергиями 284,5 эВ и 285 эВ. Разложение спектральной линии произведено методом регуляризации, описанным в [1].



a

б

*рис.1 – Спектр линии Cls поверхности катода:
a – Нерабочая сторона, индекс асимметрии 0,08
б – Рабочая сторона, индекс асимметрии 0,28*

Второй особенностью является изменение спутной структуры, являющееся характерным для каждого типа гибридизации [2]. Третья особенность – изменение формы и положения ОЖЭ-линий: форма положительного пика продифференцированной ОЖЭ-линии отражает плотность состояний в валентной полосе углерода, положение отрицательного пика – наличие запрещенной зоны. Разница в положении отрицательного пика ОЖЭ-линий для S1 и S2 подтверждает изменение типа гибридизации АК в процессе автоэмиссии [3].

Список публикаций:

- [1] Бабанов Ю.А., Каменский И.Ю., Кузнецов В.Л., Михайлова С.С., Титов П.В., Филатов А.Л. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* - 2006. - № 11. - С. 44.
 [2] F. R. McFeely, S. P. Kowalczyk, L. Ley, R. G. Carrell, R. A. Pollak, D. A. Shirley// *Physical R.* 1974 V.12(9)
 [3] Galuska A.A., Madden H.H., Allred R.E. // *Applied Surface Science* 32, 253 (1988)

Полярное представление трехзонной p-d модели с сильным электрон-фононным взаимодействием

Козлов Пётр Александрович

Овчинников Сергей Геннадьевич, Шнейдер Елена Игоревна

Сибирский федеральный университет

Овчинников Сергей Геннадьевич, д.ф.-м.н.

maruder4@gmail.com

Купраты, как семейство высокотемпературных сверхпроводников, можно охарактеризовать, тремя главными особенностями: сильной анизотропией структуры и свойств (квазидвумерность), сильными кулоновскими корреляциями на меди, и значительной величиной электрон-фононного взаимодействия. Несмотря на ряд успехов в исследовании данного класса веществ, в последнее десятилетие, адекватная модель купратов до сих пор отсутствует. Ряд экспериментальных данных подтверждает наличие в данных ВТСП, как сильных электронных корреляций (СЭК), так и сильного электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ). В связи с выше изложенным, возникает идея, о том, что для корректного описания ВТСП на основе окислов меди необходима теория, которая бы равноценно учитывала, как СЭК, так и сильное ЭФВ. Настоящая работа посвящена данной проблеме.

В данной работе мы развиваем идеологию обобщенного метода сильной связи с учетом сильного ЭФВ. Гамильтониан нашей модели изначально можно записать в следующем виде

$$H = H_{el} + H_{ph} + H_{el-ph}, \quad (1)$$

где H_{el} представлен гамильтонианом трёхзонной d-p модель, и описывает электронную структуру купратов с учётом СЭК. Второе слагаемое, H_{ph} описывает фононную часть и представляет собой набор независимых гармонических осцилляторов. H_{el-ph} описывает ЭФВ электронной структуры с двумя кислородными модами колебаний, дыхательной и изгибной. Выбор данных мод обусловлен тем, что экспериментальные данные говорят о том, что 80% энергии всех фононных мод приходится именно на эти две. Записав исходный гамильтониан, мы выполняем ортогональное преобразование с использованием функций Ванье, для того что бы избавиться от проблемы неортогональности кислородных молекулярных орбиталей на соседних ячейках. Выполнив данное преобразование, мы автоматически можем переписать исходный гамильтониан в виде

$$H = H_c + H_{cc}, \quad (2)$$

где $H_c = \sum_i h_{i0}$ представляет из себя Гамильтониан не взаимодействующих кластеров, h_{i0} Гамильтониан i -ого кластера, а H_{cc} описывает меж кластерное взаимодействие. В таком представлении большая часть ЭФВ и СЭК уже включена в H_c . Более того, оба эти взаимодействия рассматриваются на равных, в отличие от более привычных адиабатического или антиадиабатического приближений.

Далее выполняется точная диагонализация внутри – ячейечной части гамильтониана, в результате чего мы переходим к собственным состояниям, построенным на базисе многоэлектронных поляронных состояний.

На основе полученных собственных поляронных состояний мы строим X – операторы Хаббарда, выражаем через них исходные фермиевские и бозевские операторы и переписываем гамильтониан полной модели электронов и фононов с сильными взаимодействиями в поляронном представлении. А именно

$$H = \sum_n \varepsilon_n X_i^{nn} + \sum_{\alpha\beta} V_{ij}^{\alpha\beta} X_i^{+\alpha} X_j^{\beta}, \quad (3)$$

где ε_n – собственная энергия n -ого кластера, α и β корневые вектора построенные на собственных внутри ячейечных поляронных состояниях, X^+ , X^- – операторы Хаббарда, рождения и уничтожения соответственно.

Матрица $V_{ij}^{\alpha\beta}$ включает в себя межячейечное взаимодействие. Явное построение X – операторов Хаббарда, а также вычисление матрицы V , позволяют сделать в дальнейшем следующий шаг, на пути построения данной модели, а именно запись и решение уравнения движения и построение дисперсионных зависимостей электронной структуры.

Исследование фталоцианина никеля методами рентгеновской абсорбционной спектроскопии и функционала плотности

Колпачева Наталия Алексеевна

Южный федеральный университет

Авакян Леон Александрович, к.ф.-м.н.

Kolpacheva.natalia@gmail.com

Фталоцианины переходных металлов ($\text{MPC} \equiv \text{MC}_{32}\text{H}_{16}\text{N}_8$) являются перспективными материалами, они образуют устойчивые комплексные соединения. За последнее время было синтезировано множество металл фталоцианинов [1], которые могут быть использованы в нелинейной оптике, медицине, солнечной энергетике и в качестве высокостабильных красителей. В частности, недавно было обнаружено, что кристалл Ni фталоцианина, допированный атомами щелочных металлов (рис. 1), приобретает ферромагнитные свойства с необычно высокой для такого типа соединений температурой Кюри ($T_C \sim 300$ K).

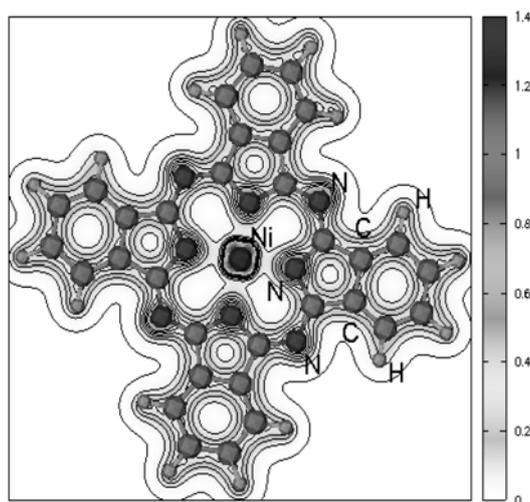


рис1. Структура фталоцианина никеля. Изолинии иллюстрируют распределение электронной плотности в плоскости молекулы, полученной с помощью DFT.

Структура NiPc была изучена с помощью методов рентгеновской дифракции еще в 1936 г [2]. Установлено, что молекула NiPc является плоской, определена пространственная группа и параметры решетки. Однако, данные о локальном окружении оказываются противоречивыми— в различных работах даются различные Ni-N расстояния для первой координационной сферы. Такое расхождение в атомной структуре приводит к проблемам при изучении электронной структуры и магнитных свойств.

В данной работе проведено исследование атомной структуры никеля в NiPc методом рентгеновской абсорбционной спектроскопии, которые дали результаты отличные от дифракционных. В результате количественного анализа Ni K-XAFS спектра NiPc получено значение длины связи Ni-N 1.90 Å. Этот результат был подтвержден дополнительным исследованием в рамках теории функционала плотности (DFT). По данным такого моделирования, такое изменение расстояния слабо меняет молекулярную структуру, оставляя ее плоской.

Список публикаций:

[1] N. B. McKeown. *Phthalocyanine Materials: Synthesis, Structure and Function*. Cambridge University Press, 1998

[2] J. Monteath Robertson and Ida Woodward. 37. an x-ray study of the phthalocyanines. part iii. Quantitative structure determination of nickel phthalocyanine. *J. Chem. Soc.*, pages 219–230, 1937.

Исследование методом ЭПР природы и структуры примесных дефектов в алмазах, выращенных в карбонатных средах Комаровских Андрей Юрьевич

Институт неорганической химии СО РАН

Надолинный Владимир Акимович, д.ф.-м.н.

komarr@ngs.ru

Кислород - содержащие дефекты в алмазах давно вызывают интерес у исследователей. Предполагалось, что центры OK1 и N3, обычно встречающиеся в натуральных алмазах типа Ib, обусловлены вхождением атомов кислорода в структуру дефектов [1]. Однако последние исследования спектров люминесценции и ЭПР этих центров показали, что данные дефекты содержат атомы титана, а не кислорода [2].

Для исследования вхождения кислорода в кристаллическую решётку были выращены алмазы в карбонатной среде. Синтез кристаллов проходил без катализаторов (Co, Fe и Ni) по «Барс» технологии на затравку. ИК спектры поглощения выращенных кристаллов содержат интенсивные линии 1332 см⁻¹ от N⁺ и 1130 см⁻¹ от замещающих атомов азота.

Спектры ЭПР исследуемых кристаллов обусловлены проявлением спектра ЭПР замещающих атомов азота и двух новых анизотропных спектров ЭПР. Исследование угловой зависимости одного из них - OX1, показало, что спектр обусловлен центром с электронным спином $S = \frac{1}{2}$ и анизотропным g- фактором со следующими значениями: $g_1=2.0113$, $g_2=2.0098$, $g_3=1.9991$. Направления главных значений g-тензора соответствуют следующим направлениям: g_1 направлен вдоль [0-11], g_2 отклонён на 9° от [100], g_3 отклонён на 9° от [011]. Второй парамагнитный центр - OX2, имеет симметрию C_{3v} и g - тензор со следующими главными

значениями: $g_{\parallel}=2.0028$, $g_{\perp}=2.0032$. Необычно высокая анизотропия g-факторов исследуемых центров при отсутствии ионов переходных металлов для кристаллов алмаза, выращенных в кислород - содержащей среде, дает основание предположить, что в структуру исследуемых центров входят атомы кислорода. В соответствии с этим предположением на основании данных по электронному состоянию центров и их симметрии для центров OX1 и OX2 предложены структурные модели в виде отрицательно заряженной расщепленной по $\langle 100 \rangle$ межузельной конфигурации $>C-O<$ (для OX1 центра) и замещающего кислорода (для OX2 центра) (рис.1). Причем донором электронов для исследуемых центров является примесный азот, состояние N^+ которого проявляется в ИК спектрах полосой 1332 см^{-1} .

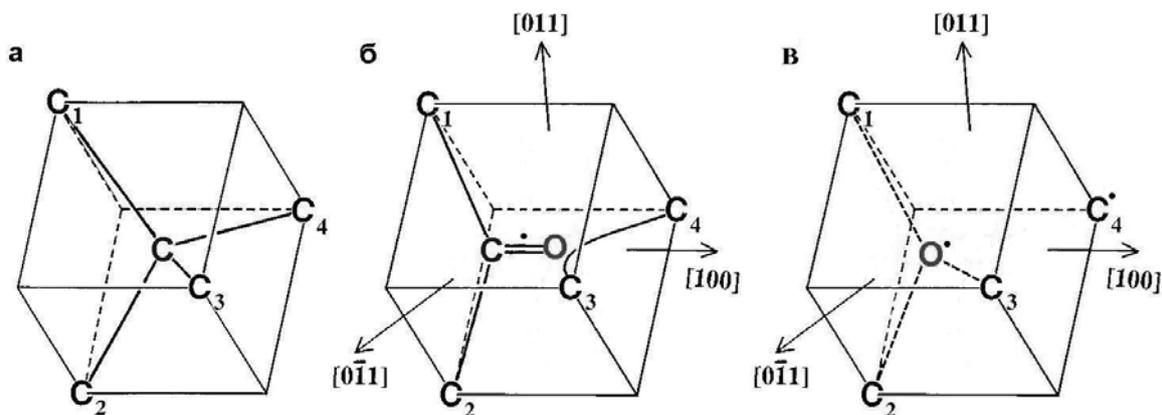


рис.1. Предполагаемая структура кислородного центра в синтетическом алмазе: а) элементарная ячейка алмаза; б) структура OX1 центра, связанного с входжением кислорода в межузельное положение; в) структура OX2 центра, связанного с захватом вакансией атома кислорода

Список публикаций:

- [1] Hill G. J, Van Wyk J. A, Hoch M. J. R //Radiation Effects & Defects in Solids. – 2001. – Vol. 156. – P. 221-225.
 [2] Nadolinny V. A., Yuryeva O. P., Rakhmanova M. I., Shatsky V. S., Palynov Yu. N., Kupriyanov I. N., Zedgenizov D. A., Ragozin A. L //European Journal of Mineralogy. (в печати)

Структура и магнитные свойства β -Fe_{1,6}Ge эпитаксиальных тонких пленок

Коньков Виталий Александрович

Мяжков Виктор Григорьевич, Бондаренко Галина Николаевна, Жигалов Виктор Степанович

Сибирский государственный аэрокосмический университет

Мяжков Виктор Григорьевич, д.ф.-м.н.

Vitalkonkovbox@mail.ru

Ферромагнитные полупроводники интенсивно изучаются как перспективные материалы для устройств спинтроники. Многие исследования направлены на изучение Mn_xGe_{1-x} ферромагнитных полупроводников, однако природа ферромагнетизма материалов на основе Ge остаётся неизвестной. Одним из возможных объяснений является рост ферромагнитных преципитатов [1,2]. В последние годы Fe_xGe_{1-x} плёночные сплавы привлекают большое внимание и только несколько сообщений посвящено формированию их росту на Fe/Ge интерфейсе [3,4]. Большой научный интерес представляет киральный (chiral) магнетизм в FeGe (кубическая структура B20) тонких плёнках, которые обладают вихреподобной спиновой структурой (skyrmions) [5,6].

В работе исследуются твёрдофазные реакции в эпитаксиальных Ge/Fe(001) плёнках. Исходные Ge/Fe(001) плёночные структуры получены последовательным термическим осаждением слоёв Ge и Fe на монокристаллическую подложку MgO(001) в вакууме 10^{-6} торр. В экспериментах использовались образцы с 1Fe:1Ge атомным отношением общей толщиной 200 нм. Осаждение слоёв Fe велось при температуре 250 °С, при которой происходил эпитаксиальный рост Fe(001) на MgO(001) поверхности. Слои Ge осаждались при комнатной температуре для предотвращения твёрдофазной реакции между Ge и Fe слоями. Исходные Ge/Fe(001)/MgO(001) образцы подвергались термическому отжигу в температурном диапазоне от 300 °С до 650 °С с шагом 50 °С и выдержкой при каждой температуре 40 минут.

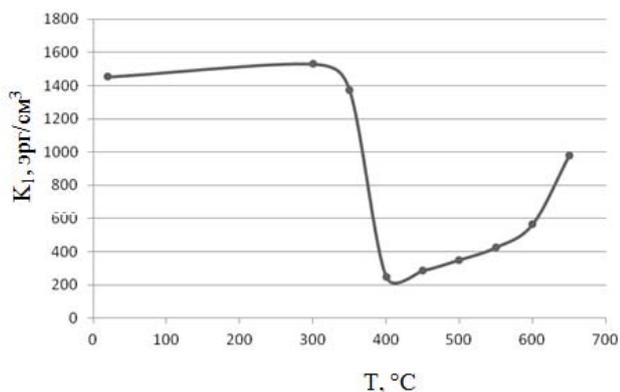


рис.1. Зависимость константы магнитокристаллографической анизотропии K_1 от температуры отжига T

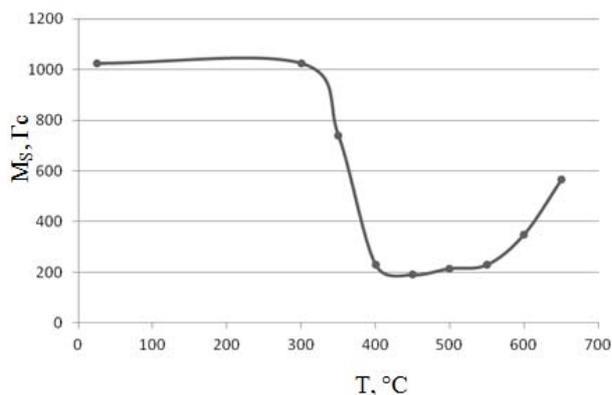


рис.2. Зависимость намагниченности насыщения M_S от температуры отжига T

Дифрактограмма исходного образца Ge/Fe(001)/MgO(001) имела рефлексы Fe(002) и поликристаллического Ge слоя. Исходные образцы в плоскости плёнки имели магнитную анизотропию, лёгкие оси которой совпадали с направлениями [110] и [1-10] подложки MgO(001) и константа была равна первой константе магнитокристаллографической анизотропии массивного железа. Анализ магнитных и рентгеновских измерений показывает, что слои Fe растут в соответствии с ориентационными соотношениями Fe(001)[110]||MgO(001)[001]. Значения намагниченности (рис.1) и константы магнитной анизотропии (рис.2) остаются постоянными до температуры 300 °C и резко меняются (падают) после отжига при 350 °C. Это указывает на инициирование твёрдофазной реакции между слоями Fe и Ge.

Образование нового рефлекса с параметрами 0,283 нм и 0,141 нм (рис.3) подтверждает начало твёрдофазной реакции между слоями Ge и Fe. Данные пики соответствуют рефлексам β -Fe_{1,6}Ge(101) и β -Fe_{1,6}Ge(202) соответственно. Фаза β -Fe_{1,6}Ge является ферромагнитной, т.к. с увеличением температуры до 650 °C происходит увеличение намагниченности и константы перпендикулярной анизотропии. Эпитаксиальный слой Fe(001) слой исходного образца полностью реагирует с поликристаллической Ge пленкой при 600 °C.

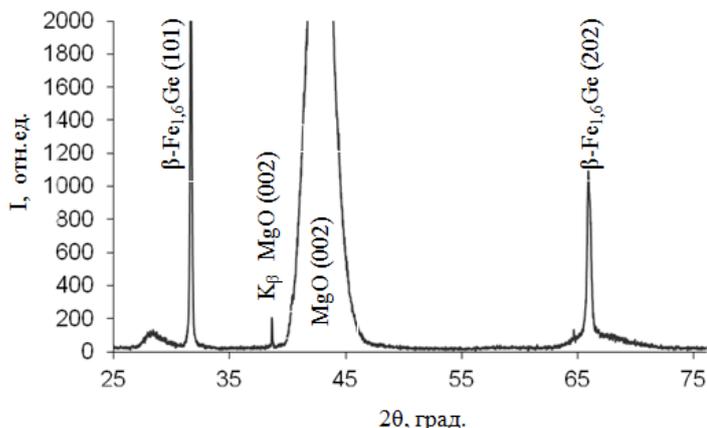


рис.3. Дифрактограмма эпитаксиальной Ge/Fe(001) пленочной системы от температуры отжига 650 °C

Таким образом, были изучены фазовые превращения в эпитаксиальных Ge/Fe(001) тонких пленках атомного состава 1Ge:1Fe с увеличением температуры до 650 °C. Фаза β -Fe_{1,6}Ge начинает образовываться при температуре порядка 350 °C. В результате, после отжига при температуре 650 °C, были получены образцы со значениями константы магнитной анизотропии K_1 равной $3,5 \cdot 10^5$ эрг/см³ и намагниченности насыщения M_S равной 600 Гс.

Список публикаций:

- [1] T. Dietl, *Nature Materials* 9, 965 (2010).
- [2] Interviews with N. Samarth and S. Chambers, *Nature Materials* 9, 955 (2010).
- [3] R. Jaafar, and et al, *Appl. Phys. Lett.* 93, 033114 (2008).
- [4] W. Gao, D. Hou, Y. Hu, and S. Wei, *Sol. State Com.* 149, 1924 (2009).
- [5] X. Z. Yu, and et al, *Nature Materials* 10, 106 (2010).
- [6] S. Muhlbauer, et al, *Science* 323, 915 (2009).

Электронная структура упорядоченного монооксида титана Ti_5O_5

Костенко Максим Геннадьевич

Лукоянов Алексей Владимирович, Ремпель Андрей Андреевич

Институт химии твердого тела УрО РАН

Ремпель Андрей Андреевич, д.ф.-м.н.

makskostenko@yandex.ru

Монооксид титана TiO_y принадлежит к сильно нестехиометрическим соединениям и обладает широкой областью гомогенности: от $y = 0.7$ до 1.3 . Это соединение интересно высоким содержанием структурных вакансий. В случае стехиометрического состава концентрация вакансий достигает примерно 15 ат. % [1]. Монооксид титана с нулевой концентрацией вакансий можно получить только при высоких давлениях и температурах [2]. В отличие от многих других сильно нестехиометрических соединений, в монооксиде титана вакансии содержатся как в подрешетке металла, так и в подрешетке неметалла. Существует два возможных типа распределения вакансий по подрешеткам: упорядоченное и неупорядоченное. Структура неупорядоченного монооксида титана обладает кубической симметрией. В этом случае вакансии распределены по узлам базисной кристаллической структуры $B1$ случайным образом. При упорядочении вакансий симметрия базисной структуры понижается до моноклинной и образуется фаза Ti_5O_5 .

В монооксиде титана существенным является ионный тип химической связи [2]. Путем расчета энергии Маделунга ионных кристаллов можно показать, что при низких температурах, когда вклад энтропии в свободную энергию невелик, упорядоченное состояние является энергетически выгодным. Однако, принимая во внимание только энергию электростатического взаимодействия ионов, невозможно объяснить, почему существование вакансий энергетически выгодно для рассматриваемого соединения.

В работе была поставлена цель - исследовать электронную структуру кубической фазы монооксида титана без вакансий и моноклинной фазы Ti_5O_5 . Расчеты проведены в рамках теории функционала плотности в приближении обобщенной градиентной поправки (GGA) на базе псевдопотенциального подхода. Данный метод позволяет не только выяснять особенности электронной структуры соединения, но и корректно вычислить полную энергию. Для моноклинной фазы выполнена релаксация атомных позиций в элементарной ячейке.

На рис. 1 представлены рассчитанные плотности электронных состояний для кубической фазы TiO без вакансий и моноклинной Ti_5O_5 , на рис. 2 – парциальные плотности электронных состояний. Низкоэнергетическая часть валентной зоны обеих фаз представлена преимущественно $2p$ состояниями кислорода, высокоэнергетическая – $3d$ состояниями титана. Ширина $p-d$ щели в случае моноклинной фазы меньше, вследствие появления состояний, индуцированных вакансиями. Обе фазы должны обладать металлическими свойствами, хотя плотность состояний на уровне Ферми для моноклинной фазы меньше, чем для кубической. Псевдощель на уровне Ферми имеет ширину 0.17 эВ и по порядку величины соответствует измеренной в работе [4] ширине запрещенной зоны для монооксида титана TiO_y ($y \geq 1.087$) с неупорядоченным расположением вакансий.

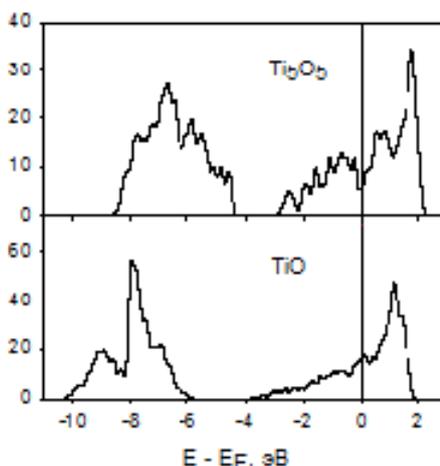


рис.1. Плотности электронных состояний для кубической фазы монооксида титана без вакансий TiO и моноклинной фазы Ti_5O_5 . Нулевое значение энергии соответствует уровню Ферми

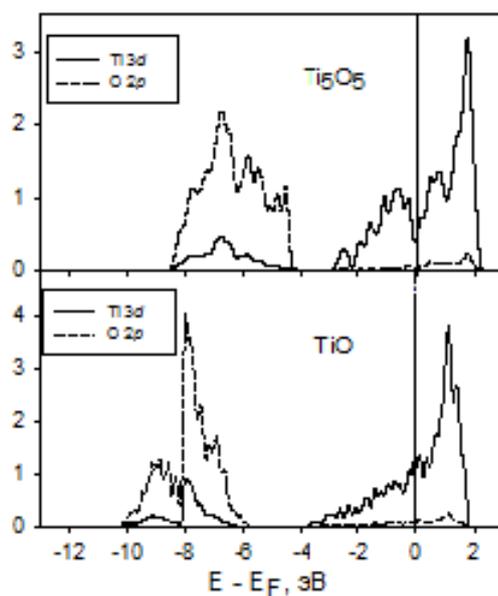


рис.2. Парциальные плотности электронных состояний для кубической фазы без вакансий TiO и моноклинной фазы Ti_5O_5 . Нулевое значение энергии соответствует уровню Ферми

Уровень Ферми кубической фазы без вакансий составляет 18.53 эВ, моноклинной фазы – 14.85 эВ. Таким образом, потери в энергии Маделунга при образовании вакансий компенсируются уменьшением энергии электронов. Из анализа результатов расчетов можно заключить, что полная энергия моноклинной фазы меньше, чем кубической. Следовательно, при достаточно низких давлениях и температурах образование вакансий энергетически выгодно, что согласуется с известными экспериментальными фактами [1, 3].

Данная работа выполнена при частичной поддержке грантов РФФИ 10-02-00546а, МК-406.2011.2 и проекта УрО РАН 12-М-23-2001.

Список публикаций:

[1] D. Watanabe, J. R. Castles, A. Jostons, and A. S. Marlin, *Acta Cryst.* 23, 307 (1967).

[2] J. B. Goodenough, *Phys. Rev. B* 5, 2764 (1972).

[3] A. Taylor and N. J. Doyle, *High Temp. - High Press.* 1, 679 (1969).

[4] A.A. Valeeva, A.A. Rempel', and A.I. Gusev, *JEPT. Lett.* 73, 621 (2001).

Расчет теплоемкости суперионного проводника AgCuSe

Курбангулов Азат Рифкатович

Степанов Юрий Михайлович, Аносов Евгений Александрович, Карагулов Руслан Фаритович

Стерлитамакская государственная педагогическая академия им. Зайнаб Бишиевой

Биккулова Нурия Нагимьяновна

azatkurbanstr@mail.ru

AgCuSe имеет смешанную ионно-электронную проводимость и существует в виде двух полиморфных модификаций: низкотемпературной несуперионной β -фазы и высокотемпературной α -фазы, для которой характерна высокая ионная проводимость. Фазовый переход $\beta \rightarrow \alpha$ в AgCuSe происходит при температуре $T = 473 - 480$ К. Структура низкотемпературной фазы β - AgCuSe кристаллизуется в ромбической сингонии (пространственная группа – $Pm\bar{m}n$) с параметрами решётки $a = 4,105$ Å, $b = 20,35$ Å, $c = 6,31$ Å и $Z = 10$. Структура высокотемпературной фазы AgCuSe была определена как кубическая (пространственная группа $Fm\bar{3}m$) с периодом $a = 6,112(1)$ Å и числом формульных единиц в ячейке $Z = 4$, образованная атомами селена в позициях $4a$ (0,0,0) и атомами меди и серебра, распределенными случайно по позициям $8c$ (0,25, 0,25, 0,25) и $32f(x, x, x)$, $x = 0,407$ [1].

Из плотности фононных состояний $g(\omega)$ для α - AgCuSe и β - AgCuSe (рис. 1) рассчитывались температурные зависимости теплоёмкости C_V при постоянном объеме до и после фазового перехода [2].

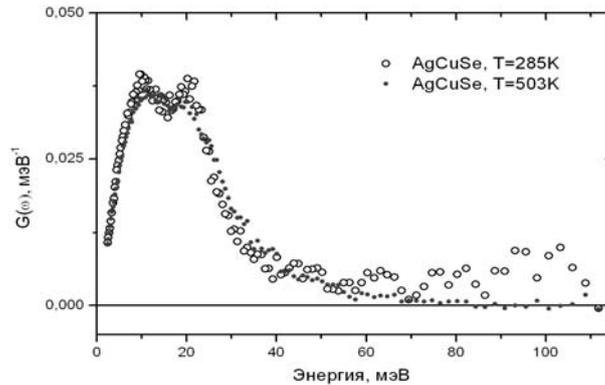


рис. 1. Зависимость плотности фононных состояний твердого раствора AgCuSe от энергии при температуре 285 К и 503 К.

Расчет теплоемкостей проводился по формуле (1):

$$C_V(T) = \frac{R}{2} \int \left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right)^2 g(\omega) n(\omega, T) [n(\omega, T) + 1] d\omega \quad (1)$$

где R – универсальная газовая постоянная; k_B – постоянная Больцмана; $n(\omega, T) = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} \right) - 1 \right]^{-1}$ –

фактор Бозе; $g(\omega)$ – плотность фононного спектра.

В среде программирования Delphi была рассчитана теплоемкость AgCuSe на основе данного фононного спектра и построена температурная зависимость теплоемкости AgCuSe до и после фазового перехода при температуре 475 К.

По виду кривых теплоемкости было установлено, что фазовый переход является фазовым переходом второго рода, так как происходит скачкообразное изменение теплоемкости на границе фазового перехода. Значение теплоемкости соединения AgCuSe при комнатной температуре (293 К) составляет 66,5 Дж/моль·К. При аппроксимации кривых теплоемкости фазового перехода $\beta \rightarrow \alpha$ до 0К разница в значениях теплоемкости при комнатной температуре (293 К) составляет 6,3 Дж/моль·К. Уменьшение теплоемкости после фазового перехода свидетельствует о том, что фазовый переход является следствием структурной разупорядоченности подрешетки Ag или Cu и полиморфным переходом из ромбической в кубическую ГЦК- решетку, в ходе которого происходит смягчение упругих мод между ионами серебра и меди.

Список публикаций:

[1] Shimoyama T., Arai M., Sakuma T., Crystal structure of superionic phase of AgCuSe, in: 1st International Meeting on Superionic Conductors Physics (IDMSICP), Kyoto, 2003.

[2] Биккулова Н.Н., Асылгужина Г.Н., Степанов Ю.М., Скоморохов А.Н., Ядровский Е.Л., Бескровный А.Н. Кристаллическая структура и ионный перенос в AgCuSe // Известия РАН, серия физическая. М., Наука. 2006. Т 70. №4. – С. 559-560.

Спин-решеточная релаксация ^1H в гидридах бинарных сплавов $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x$

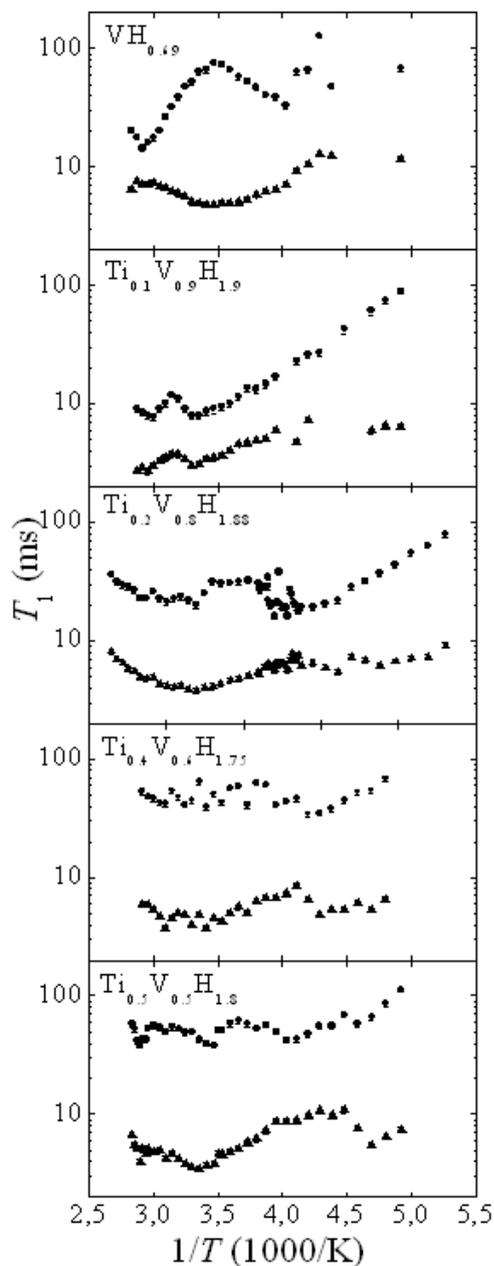
Куренкова Елена Владимировна

Выводцева Анна Витальевна, Иевлев Александр Вячеславович.

Санкт-Петербургский государственный университет

Шеляпина Марина Германовна, к.ф.-м.н.

kurenkova_elena@mail.ru



В настоящее время все чаще в качестве материалов для хранения водорода рассматриваются сплавы на основе переходных металлов, таких как Ti, V, Cr. Несмотря на сравнительно небольшую сорбционную емкость (до 3.2 весовых процентов, wt.%), эти системы удобны тем, что, изменяя состав сплава, можно варьировать температуру выхода водорода в широком диапазоне. Кроме того, данные соединения демонстрируют высокую кинетику сорбции водорода. В большинстве случаев добавление ванадия приводит к увеличению абсорбции водорода. Кроме того, ванадий влияет не только на температуру, но и на характер выделения водорода.

Адсорбционные и десорбционные свойства гидридов, важные для практических приложений, зависят, в том числе, и от энергий активации диффузии водорода. Для оптимизации данных сплавов с точки зрения определения позиций водорода и его подвижности наиболее информативным является метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР). В данной работе методом ЯМР была исследована температурная зависимость времени спин-решеточной релаксации ядер ^1H в гидриде ванадия $\text{VH}_{0.69}$ и в насыщенных гидридах бинарных сплавов $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x$ ($x = 0.5, 0.6, 0.8$ и 0.9).

Все гидриды были приготовлены методом гидридного цикла, описанном в работах [1,2]. Согласно данным рентгеноструктурного анализа исследуемые бинарные сплавы имеют ОЦК структуру и после насыщения водородом переходят в ГЦК структуру. Анализ второго момента линии поглощения ЯМР ^1H в поле 1 Тл при комнатной температуре показал, что атомы водорода занимают преимущественно тетрагональные интерстиции ГЦК решетки.

Измерение температурной зависимости времени T_1 ядер H проводилось на релаксметре ЭХО-12 на частоте 20 МГц в температурном диапазоне от 190 К до 380 К. Было получено, что в исследуемом температурном диапазоне для всех исследуемых соединений время T_1 имеет две компоненты, различающиеся почти на порядок (рис.1). Температурные зависимости времени T_1 для всех исследуемых гидридов имеют довольно сложный характер, в отличие от гидридов тройных сплавов Ti-V-Cr [3]. Для гидрида $\text{VH}_{0.69}$ можно показать, что экстремумы температурных зависимостей времен спин-решеточной релаксации соответствуют точкам

структурного фазового перехода: 240 К и 340 К. Соответственно и для бинарных сплавов наблюдаемые экстремумы должны соответствовать структурным фазовым превращениям.

Список публикаций:

1. A.G. Aleksanyan, S.K. Dolukhnyan, V. Sh. Shekhtman, J. Huot, O.P. Ter-Galstyan, N.L. Mnatsakanyan, *Journal of Alloys and Compounds* 509 (2011) p.786-789.
2. S.K. Dolukhnyan, H.G. Nakobian, A.G. Aleksanyan, *Int. J. of SHS* 1 (1992) 530-535.
3. Касперович В.С., Харьков Б.Б., Рыков И.А., Лавров С.А., Шеляпина М.Г., Чернышев Ю.С., Чижик В.И., Скрабина Н.Е., Fruchart D., Miraglia S. *Физика твердого тела* 53, 214-221 (2011).

Влияние температуры на порог протекания в одномерном магнетике с учетом взаимодействия ближайших соседей

Лауров Евгений Петрович

Удодов Владимир Николаевич

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова

Удодов Владимир Николаевич, д.ф.-м.н.

layurover@yandex.ru

В последнее время усилился интерес к одномерным магнетикам в связи с тем, что были синтезированы вещества, которые можно рассматривать как аналоги низкоразмерных модельных систем. Несмотря на значительное количество исследований различных свойств малых одномерных магнетиков, их критические свойства далеко не изучены. Особый интерес к низкоразмерным магнетикам обусловлен перспективностью их использования в качестве магнитных носителей информации нового поколения [1].

Моделирование систем конечных размеров позволяет воспроизвести многие существенные черты фазовых переходов, а исследование их особенностей, в зависимости от размеров системы, дает много ценной информации о фазовых переходах в “бесконечных” системах. Также все большее внимание уделяется вопросам моделирования, связанным с природой образования различных вариантов упорядоченных фаз одномерных магнетиков, имеющих сложную структуру [2, 3].

Целью работы является исследование влияния температуры на порог протекания в одномерном магнетике с учетом энергии взаимодействия вторых и третьих соседей в рамках обобщенной модели Изинга с «оборванными концами» при малом числе узлов и для разного радиуса протекания. Такие граничные условия моделируют или линейный кластер или линейную магнитную цепочку на поверхности кристалла.

Гамильтониан системы имеет вид:

$$e = \frac{E_0}{\omega_1} = -h \sum_{i=1}^N S_i - \sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} - J_2 \sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+2} - J_3 \sum_{i=1}^{N-3} S_i S_{i+3}, \quad (1)$$

где безразмерная проекция вектора спина на некую ось равна $S_i = 1$ (если спин направлен вверх), $S_i = -1$ (если спин направлен вниз); h - безразмерная напряженность магнитного поля (проекция на ту же ось),

E_0 - энергия кристалла, ω_1 - энергия взаимодействия ближайших соседей, $J_2 = \omega_2 / \omega_1$ - относительный энергетический параметр взаимодействия вторых соседей, $J_3 = \omega_3 / \omega_1$ - относительный энергетический параметр взаимодействия третьих соседей [3].

Температура измеряется в безразмерных единицах:

$$\theta = \frac{kT}{\omega_1}, \quad (2)$$

где k - постоянная Больцмана; ω_1 - энергия взаимодействия ближайших соседей; T - абсолютная температура.

При перколяционном подходе узел, на котором $S_i = -1$, считается заблокированным узлом, а если $S_i = +1$ - целым [4].

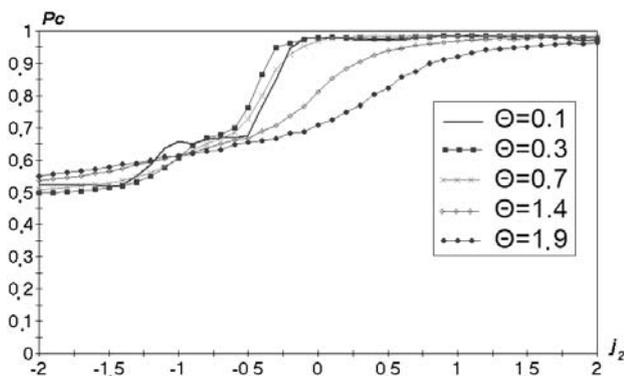


рис.1. Зависимость порога протекания P_c от взаимодействия вторых соседей j_2 , радиус протекания $R=3$, $h=0.3$, $N=10$.

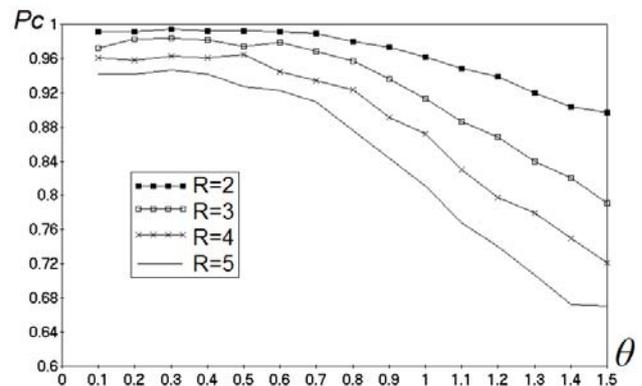


рис.2. Зависимость порога протекания от температуры θ при $j_2=0.1$, $j_3=0.1$, $h=0.1$, $N=10$.

Нами была исследована зависимость порога протекания от температуры и параметров взаимодействия вторых и третьих соседей. На рисунках 1 и 2 представлены графики зависимости порога протекания от относительного параметра взаимодействия вторых соседей и температуры.

Из рисунка 1 видно, что порог протекания возрастает от 0,5 до 1 при увеличении взаимодействия вторых соседей и с увеличением температуры графики зависимости порога протекания от параметров взаимодействия вторых соседей становятся плавными. Аналогичная картина наблюдается и при учете взаимодействия третьих и четвертых соседей. Температура влияет на порог протекания гораздо сильнее, чем увеличение радиуса протекания, что хорошо видно из рисунка 2.

Доказано, что порог одномерного протекания существенно зависит от взаимодействия вторых и третьих соседей, то есть он или возрастает, или уменьшается, в зависимости от того какая магнитная фаза преобладает при данных параметрах. При увеличении взаимодействия вторых соседей порог протекания возрастает (рис. 1), но в случае с взаимодействием третьих и четвертых соседей или может и уменьшаться.

Список публикаций:

- [1] Удодов В.Н., Потеев А.И., Попов А.А. и др. Моделирование фазовых превращений в низкоразмерных дефектных наноструктурах. Абакан: Издательство ХГУ им. Н.Ф. Катанова, 2008. 158 с.
- [2] Шкловский Б.И. Теория протекания и проводимость неоднородных сред // УФН. 1992. Т. 117. № 3. С. 401-435.
- [3] Спирин Д.В. Особенности критической динамики изинговских наноразмерных магнетиков / Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук // Томск. ИФПМ СО РАН, 2008. 18 с.
- [4] Санников Е.В., Козлитин Р.А., Удодов В.Н., Потеев А.И. Фазовые переходы в одномерных магнетиках // Изв. вузов. Физика. Томск, 2006. № 3. С. 54-58

Исследование зонной структуры β -SiC из первых принципов

Логвинов Павел Александрович

Кемеровский государственный университет

Золотарев Михаил Леонидович, к.ф.-м.н.

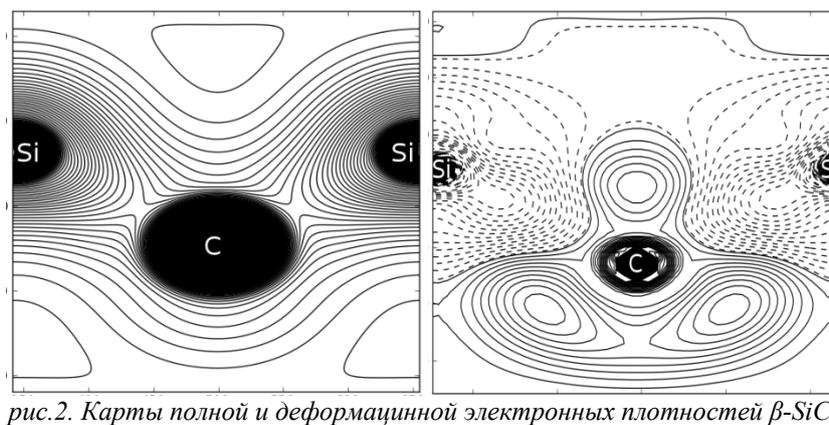
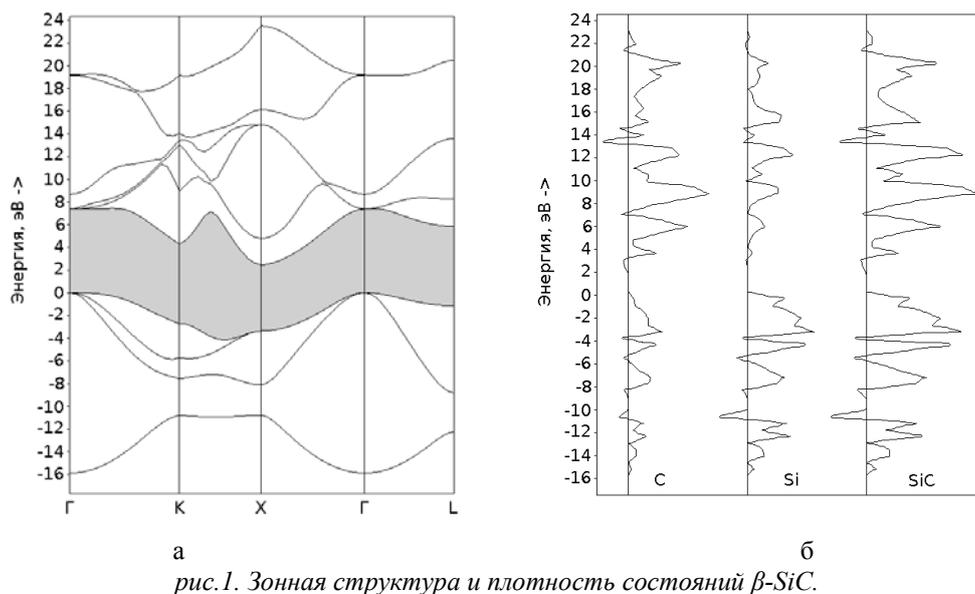
paul-mail@yandex.ru

β -SiC хорошо известный, детально исследованный как экспериментально [1], так и теоретически [2] материал, группы симметрии $T_d^2 - F43m$. В последнее время к нему возрос интерес из-за возможности использования в качестве подложки при промышленном синтезе графена [3]. Для теоретического моделирования процессов такого синтеза необходимы надежные волновые функции, которые описывали бы зонную структуру, как на различных гранях поверхности кристалла, так и внутри него.

В данной работе мы получили зонную структуру β -SiC первопринципным методом функционала плотности с использованием вычислительного комплекса Crystal'06. Набор базисных функций для C и Si, а так же модель обменно-корреляционного потенциала выбирались так, чтобы получить максимальное совпадение по геометрии кристалла и шириной запрещенной зоны с экспериментом. Было установлено, что использование базисов Si_65-111G*_darco_1993 и C_6-31d1G_gatti_1994 для кремния и углерода соответственно, а так же обменно-корреляционного потенциала BECKE-PW91, позволяет достигнуть минимума энергии при параметре решетки 4.37 Å (экспериментальное значение 4.35 Å) и получить значение запрещенной зоны 2.38 эВ (экспериментальное значение 2.39 эВ). Таким образом, достигается необходимая точность ~3%.

На рисунке 1 представлены полученные а) зонный спектр в симметричных направлениях зоны Бриллюэна (обозначения согласно [2]) и б) плотность состояний β -SiC. Как видно из рисунка 1, β -SiC является непрямым полупроводником, но в отличие от кристаллического кремния, дно зоны проводимости находится в симметричной точке зоны Бриллюэна. Это совпадает с результатами расчетов других авторов [2][4].

На рисунке 2 представлено рассчитанное распределение заряда в плоскости (110), где лежат ближайшие соседние атомы. Результаты показывают, что в отличие от классических алмазоподобных полупроводников химическая связь в β -SiC значительно более ионная.



Полученные результаты в дальнейшем планируется применить для расчета поверхностных состояний кристалла в разных направлениях и моделирования взаимодействия поверхности с модификациями углерода в газообразной фазе.

Список публикаций:

- [1] W. J. Choyke, D. R. Hamilton, and Lyle Patrick, *Phys. Rev.* 133, A1163 (1964).
- [2] L. A. Hemstreet, Jr. and C. Y. Pong, *Phys. Rev. B* 6, 4 (1972).
- [3] de Heer, A. Walt, *Solid State Communications* 92 (2007).
- [4] P. Käckell, B. Wenzien, and F. Bechstedt, *Phys. Rev. B* 50, 15 (1994).

Применение рентгеновских методов для анализа многослойных наноструктур

Мамонтов Александр Иванович

Сыктывкарский государственный университет

Петраков Анатолий Павлович, д.ф.-м.н.

snowchek@mail.ru

В последние годы значительное внимание уделяется изучению свойств квантово-размерных многослойных структур, что связано с перспективой их практического использования (в приборах оптоэлектроники, для создания полевых транзисторов, солнечных батарей и др.). В этом плане чрезвычайно важной становится информация о структуре этих объектов. Наиболее чувствительными и информативными методами неразрушающего контроля реальной структуры сверхрешеток являются рентгеновские методы исследования.

Исследуемые образцы представляют собой многослойные гетероструктуры PbEuSe/PbSe выращенные молекулярно-лучевой эпитаксией на подложке кремния Si(111) с двумя буферными слоями CaF₂ и BaF₂.

На рис.1 приведена дифрактограмма одного из образцов. Параметр d определяется по формуле (1). Рассматриваемые пики соответствуют кубической решетке PbSe и аморфной PbEuSe.

$$d = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}. \quad (1)$$

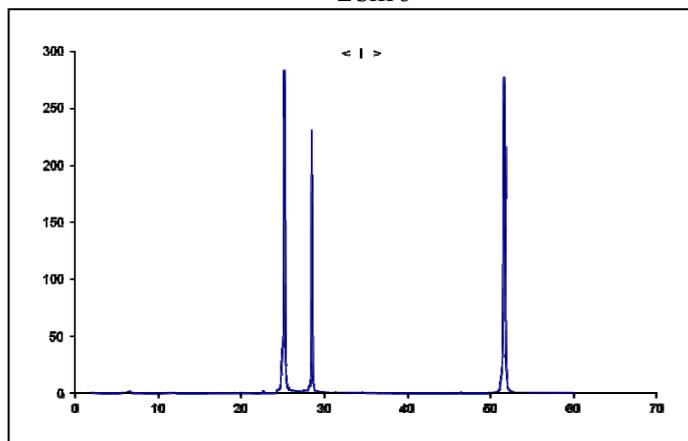


рис.1. Дифрактограммы образца

Также были получены и проанализированы кривые рентгеновской рефлектометрии. Образец имеет структуру, как показано на рис.2.

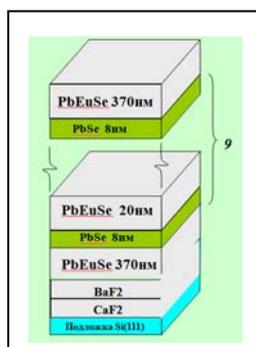


рис.2. Структура образца

Показано, что методами рентгеновской дифрактометрии и рефлектометрии успешно проведена диагностика многослойных структур, содержащих квантовые ямы и квантовые точки.

Работа выполнена в рамках Программы «Развитие научного потенциала Высшей школы на 2009-2012 годы (проект № 2.1.1/5848).

Изучение механизма деформации и процессов локализации пластического течения при сжатии $\langle 111 \rangle$ монокристаллов стали Гадфильда

Мельников Евгений Васильевич

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

**Институт физики прочности и материаловедения СО РАН*

**Астафурова Елена Геннадьевна, к.ф.-м.н.*

melnickow-jenya@yandex.ru

Методами оптической металлографии, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии проведены исследования механизмов пластической деформации $\langle 111 \rangle$ монокристаллов аустенитной стали Гадфильда (Fe-13Mn-1.3C, мас. %) при одноосном сжатии.

Экспериментально показано, что в $\langle 111 \rangle$ монокристаллах стали Гадфильда пластическое течение на первой стадии деформации ($\epsilon < 15\%$) проходит с низким коэффициентом деформационного упрочнения и сопровождается срывами нагрузки. С предела текучести деформация развивается скольжением в нескольких системах одновременно и сопровождается формированием и развитием полос локализованной пластической

деформации (ПЛД) (рис.1 а). ПЛД делят весь объем кристалла на деформированные и недеформированные области. Полосы не имеют четкой кристаллографической ориентации (рис.1). Пластическая деформация сосредоточена в полосах. Внутри полос наблюдается однородное распределение дислокаций скольжения и механическое двойникование. При последующем деформировании ($\epsilon > 15\%$) пластическое течение становится устойчивым и происходит во всем объеме материала скольжением и двойникованием, кривая течения не имеет срывов и характеризуется большим коэффициентом деформационного упрочнения по сравнению со стадией образования полос сдвига.

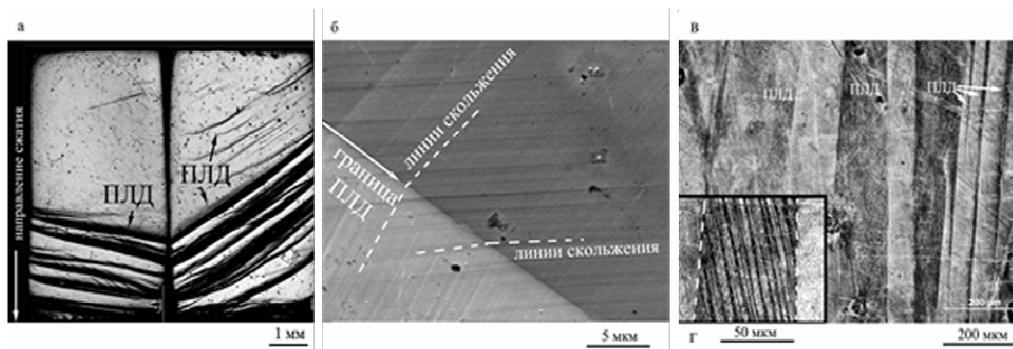


рис.1. Изображения поверхности (а) ($\epsilon = 3,5\%$) и структура ПЛД (б, в) ($\epsilon = 5\%$) $\langle 111 \rangle$ монокристаллов стали Гадфильда после сжатия: б - граница макрополосы и линии скольжения, в - изображение ПЛД после переполіровки и травления

При отклонении от точного полюса $[111]$ вдоль симметралы $[111]$ - $[011]$ на угол $5-8^\circ$ также наблюдается образование макрополос деформации (рис.2 а). На первой стадии пластического течения скорость деформационного упрочнения близка к нулю, наблюдаются срывы нагрузки, как и в случае сжатия вдоль точной ориентации $[111]$. Кривая течения монокристаллов с отклонением на угол 15° гладкая, наблюдается стадия с нулевым упрочнением. Деформация с начала пластического течения проходит во всем объеме образца (рис.2 б). Переполіровка и последующее травление деформированных образцов показывает, что деформация связана с двойникованием преимущественно в одной системе.

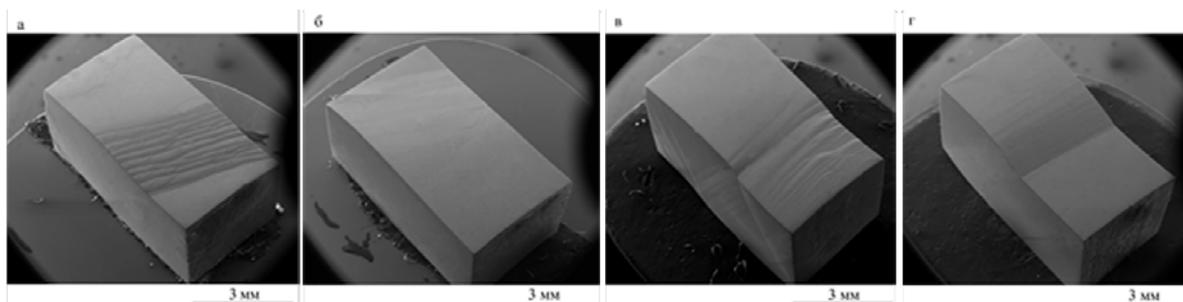


рис.2. Металлографические картины поверхности деформированных $\langle 111 \rangle$ монокристаллов стали Fe-13Mn-1.3C при сжатии, $T=300\text{K}$: а; б – отклонение от точной ориентировки $[111]$ вдоль симметралы $[111]$ - $[011]$: а – 8° ($\epsilon = 4,3\%$), в – 15° ($\epsilon = 4,4\%$); в, г – отклонение от точной ориентировки $[111]$ вдоль симметралы $[111]$ - $[001]$: г – 8° ($\epsilon = 3,4\%$), в – 15° ($\epsilon = 3,9\%$)

Похожие закономерности формирования полос деформации демонстрируют монокристаллы, ось которых отклонена от полюса $[111]$ вдоль симметралы $[111]$ - $[001]$. При отклонении на 8° упрочнение низкое, образование макрополос сдвига сопровождается деформацией в объеме образца уже на ранней стадии деформации (рис.2 в). При отклонении на $14-17^\circ$ образование ПЛД подавлено. Деформация с начала пластического течения проходит во всем объеме образца (рис.2 г), при переполіровке и травлении вытравливаются две системы двойникования. Кривые течения монокристаллов гладкие, без срывов нагрузки.

Таким образом, проведенные исследования показали, что деформация $\langle 111 \rangle$ монокристаллов имеет неоднородный характер и сопровождается формированием и развитием полос локализованной пластической деформации. Однако отклонение от точной ориентации $[111]$ вдоль симметралы $[111]$ - $[001]$ и $[111]$ - $[011]$ приводит к подавлению развития локализованной деформации за счет активации механического двойникования. Множественное скольжение с предела текучести способствует образованию полос локализованной деформации, а механическое двойникование подавляет их развитие.

Исследования проводили с использованием оборудования ТМЦКП. Авторы выражают благодарность профессору Ю.И. Чумлякову за предоставление монокристаллов для исследования.

Термолюминесценция порошков h-BN после УФ - облучения

Минин Максим Геннадьевич

Вохминцев Александр Сергеевич, Вайнштейн Илья Александрович

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина

Вайнштейн Илья Александрович, д.ф.-м.н.

minin@intertech-corp.ru

Уникальность электрофизических свойств гексагонального нитрида бора, высокая температурная, химическая, радиационная стабильность делают его перспективным материалом для радиационно-оптических и дозиметрических применений [1 – 4]. Наведенный люминесцентный отклик в облученном h-BN при термической и оптической стимуляции проявляется в области фотонных энергий видимого диапазона и обусловлен эмиссионной активностью дефектных комплексов собственного и примесного генезиса [5]. Ранее нами были изучены механизмы оптически стимулированной (ОСЛ) и катодо- (КЛ) люминесценции в порошках нитрида бора. Цель настоящей работы заключалась в изучении особенностей термолюминесценции (ТЛ) порошков h-BN, возбужденных ультрафиолетовым излучением.

В работе исследовался порошкообразный гексагональный нитрид бора, синтезированный по карбамидной технологии на опытном заводе ФГУП «УНИХИМ с ОЗ». В окончательном виде порошок имел характерную чешуйчатую морфологию [5]. Содержание нитрида бора в исследуемых образцах составляло 98.9 мас.%, борного ангидрида – 0.17 мас.%, углерода – 0.22 мас.%. Средний размер агломератов частиц составлял 24 мкм.

Исследования проводили на оригинальном спектрометрическом комплексе. Облучение порошков осуществляли нефилтрованным УФ излучением лампы ДДС-30. Время экспозиции составляло 2 минуты, регистрация термостимулированного свечения производилась в ходе нагрева до 900 К с постоянной скоростью 2 К/с. Для измерений люминесценции использовали монохроматор МУМ и ФЭУ-39А с набором оптических стекол (СЗС-22, УФС-6). ТЛ свечение регистрировали при длинах волн – 380 и 440 нм. Указанные полосы соответствуют максимумам основных компонент в спектрах КЛ, которые были изучены нами ранее в [6].

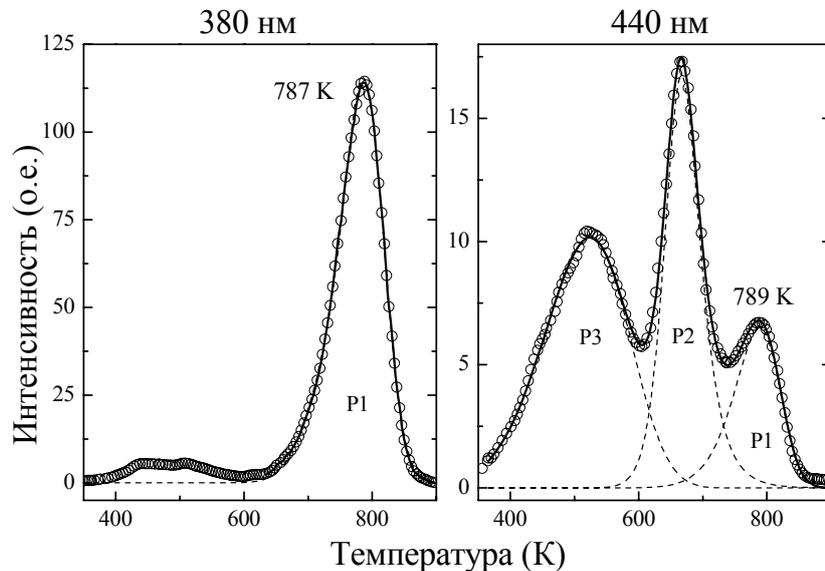


рис.1 Кривые ТЛ, измеренные в различных полосах свечения

Символы – эксперимент; штриховые линии – разложение на ТЛ компоненты с использованием уравнения (1); сплошная линия – кумулятивная расчетная кривая.

На рис.1 приведены измеренные кривые ТЛ. Видно, что структура пиков для различных спектральных диапазонов существенно различается. В области 380 нм доминирует ТЛ максимум при 787 К, в области 440 нм наблюдаются три ярко выраженные компоненты с наиболее интенсивным пиком при $T_{max} = 667$ К. Количественный анализ данных был выполнен с использованием формализма кинетических процессов общего порядка:

$$I(T) = s^n \cdot n_0 \cdot e^{-\frac{E}{kT}} \cdot \left(1 + \frac{s^n \cdot (b-1)}{r} \cdot \int_{T_0}^T e^{-\frac{E}{kT'}} \cdot dT' \right)^{\frac{b}{b-1}}, \quad (1)$$

где s'' – «эффективный» частотный фактор, c^{-1} ; n_0 – концентрация электронов на ловушках в начальный момент времени, cm^{-3} ; E – энергия активации, эВ; k – постоянная Больцмана, эВ/К; T – температура образца, К; b – порядок кинетики; T_0 – начальная температура.

Геометрические и кинетические параметры расчетных ТЛ компонент (рис.1) приведены в Таблице:

Полоса свечения	Пик ТЛ	T_{max} , К	ω , К	μ_g	E , эВ	s'' , c^{-1}	b
380 нм	P1	787	85	0,45	1.50	$2.26 \cdot 10^8$	1.07
440 нм	P1	789	84	0,53	1.56	$5.14 \cdot 10^8$	1.12
	P2	667	65	0,38	2.06	$3.51 \cdot 10^{14}$	2.18
	P3	524	157	0,41	0.31	$2.75 \cdot 10^1$	1.00

Анализ литературных данных [6 и ссылки в ней, 7] позволяет предположить, что основными рекомбинационными центрами в исследуемых ТЛ процессах выступают примесные углеродные и бор-кислородные комплексы. Активные ловушки, которые опустошаются в рассматриваемом температурном диапазоне, сформированы одноборным (one-boron) и трехборным (three-boron) центрами. Тем не менее, для более точной идентификации дефектов, ответственных за ТЛ-активность порошков h-BN, необходимы дальнейшие работы с варьированием скоростей нагрева, видов и режимов облучения, а также применение дополнительных спектроскопических методик.

Список публикаций:

- [1] Watanabe K., Taniguchi T., Kanda H. // *Nature Materials*. 2004. V. 3. P. 404.
 [2] Museur L., Feldbach E., Kanaev A. // *Phys. Rev. B*. 2008. V.78. P. 155204-1.
 [3] Kubota Y., Watanabe K., Tsuda O., Taniguchi T. // *Science*. 2007. V. 317. P. 932.
 [4] Watanabe K., Taniguchi T. // *Int. J. Appl. Ceram. Technol.* 2011. V. 8. P. 977.
 [5] Вайнштейн И.А., Вохминцев А.С., Минин М.Г., Чайкин Д.В., Карташов В.В., Власов А.В., Карабаналов М.С. / *межвузовский сборник трудов. «Проблемы спектроскопии и спектрометрии»*. Екатеринбург: УрФУ. 2011. Вып. 28. С. 38.
 [6] Минин М.Г., Вайнштейн И.А., Вохминцев А.С., Карташов И.В., Чернецкий И.В. / *межвузовский сборник научных трудов. «Проблемы спектроскопии и спектрометрии»*. Екатеринбург: УрФУ. 2011. Вып. 29. С. 82.
 [7] Katzir A., Suss J.T., Zunger A., Halperin A. // *Phys. Rev. B*. 1975. V.11. P. 2370.

Диэлектрические свойства тонкого слоя магнитной жидкости с графитовым наполнителем в магнитном поле

Мкртчян Левон Спартакович
Шевченко Александр Александрович

Ставропольский государственный университет

Диканский Юрий Иванович, д.ф.-м.н.

mkrt-levon@yandex.ru

Магнитные жидкости представляют собой устойчивую коллоидную дисперсию однодоменных наночастиц ферро- или ферритмагнитных материалов в несущей жидкости [1]. На основе магнитных жидкостей оказалось возможным создание новых композиционных сред, которые проявляют более заметную зависимость своих свойств от воздействия магнитных и электрических полей, чем сама жидкость.

Электрические свойства композиционных материалов вообще [2] и созданных на основе магнитных жидкостей в частности [3, 4] изучены достаточно подробно в существующей литературе. При этом в гораздо меньшей степени исследованы закономерности электрических свойств тонких слоев данных материалов. Если композиционная среда, содержащая проводящие дисперсные частицы, образует относительно тонкую прослойку между поверхностями электродов, ряд особенностей электрических свойств такой системы может быть обусловлен образованием между электродами проводящих «мостов» [5].

В данной работе экспериментально исследуется диэлектрическая проницаемость системы, в которой процессы структурообразования и, в частности, возникновение проводящих «мостов» происходят под действием магнитного поля и не зависят от электрического.

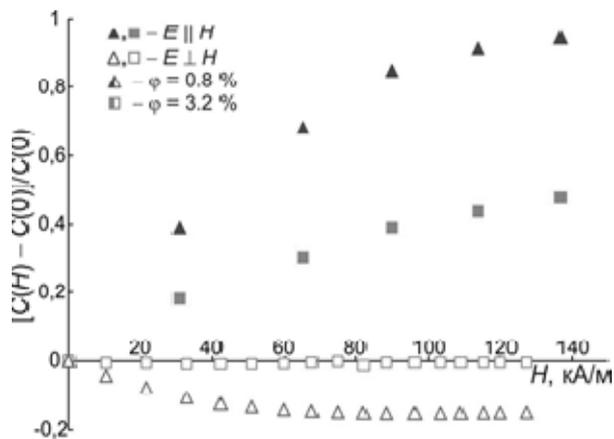


рис. 1. Зависимости относительного изменения емкости ячейки от величины напряженности внешнего магнитного поля при различных взаимных ориентациях магнитного и электрического полей и при низких концентрациях графита

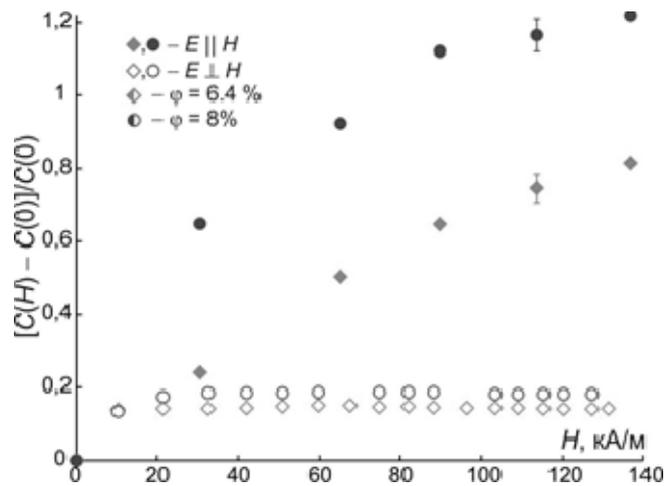


рис. 2. Зависимости относительного изменения емкости ячейки от величины напряженности внешнего магнитного поля при различных взаимных ориентациях магнитного и электрического полей и при высоких концентрациях графита.

В экспериментальных исследованиях применялась магнитная жидкость на основе керосина, содержащая наночастицы магнетита размером 10 нм стабилизированные олеиновой кислотой. Плотность магнитной жидкости составляла 1400 кг/м³, намагниченность насыщения равнялась 55.4 кА/м, начальная магнитная проницаемость имела значение 5.2, диэлектрическая проницаемость 4.9, удельная электрическая проводимость 3.1·10⁻⁶ См/м. Порошок микрочастиц графита был получен путем механического дробления, при этом средний размер частиц составлял ~ 10 мкм. Плотность применявшегося графита равнялась 1785 кг/м³. Некоторое количество порошка добавлялось в магнитную жидкость для получения суспензии с определенным объемным содержанием графита. Затем данная суспензия перемешивалась при помощи ультразвука.

Далее суспензия помещалась в измерительную ячейку, представлявшую собой два плоских прямоугольных медных электрода размером 27.4 × 20.6 мм с расстоянием между ними 200 мкм. Проводились измерения емкости такой ячейки. Для этого она подключалась к измерительному мосту переменного тока с частотой измерительного сигнала 1 кГц. Величина измерительного электрического поля была весьма мала и не влияла на структурное состояние суспензии в ячейке (величина подаваемого измерительного напряжения 0.5 В). Для изучения влияния процессов структурообразования в суспензии на электрические параметры ячейки она помещалась между полюсами электромагнита в области однородного магнитного поля.

При воздействии магнитного поля сонаправленного с электрическим измерительным полем наблюдалось возрастание емкости ячейки. На рисунках 1 и 2 представлены полученные экспериментальные зависимости относительного изменения емкости ячейки, вызванного действием поля, от величины напряженности внешнего магнитного поля H, при различных значениях объемной концентрации графита φ. Как видно из рисунка, с увеличением напряженности магнитного поля емкость ячейки нелинейно возрастает, стремясь к насыщению при высоких значениях напряженности. Это должно свидетельствовать о том, что в данном случае имеет место упорядочивание проводящих «мостов» между электродами и увеличение их количества. Как видно из рисунков, относительное изменение емкости ячейки под действием поля тем значительнее, чем выше концентрация графита.

Иной характер имеют зависимости емкости ячейки в случае, когда внешнее магнитное поле перпендикулярно электрическому измерительному полю. При малых концентрациях графита в этом случае наблюдается убывание емкости ячейки с увеличением напряженности магнитного поля (рис. 1), что свидетельствует об ослаблении контакта между электродами посредством проводящих «мостов». В случае же больших концентраций графита воздействие перпендикулярного магнитного поля вновь приводит к возрастанию емкости ячейки, которое, однако, гораздо менее выражено, чем в случае параллельных полей, и быстро выходит на насыщение с ростом напряженности магнитного поля. Соответствующие экспериментальные зависимости представлены на рис. 2.

Таким образом, в результате проведенных исследований получены зависимости емкости ячейки, заполненной суспензией графитовых микрочастиц в магнитной жидкости, от величины и направления внешнего магнитного поля. На основании полученных результатов можно заключить, что электрические параметры данной системы в ряде случаев могут изменяться более чем на порядок под действием магнитного

поля. Данный факт представляет собой существенный результат и может найти практическое применение в работах по синтезу новых функциональных материалов, а также при создании управляемых электротехнических модулей.

Список публикаций:

- [1] Блум Э.Я., Майоров М.М., Цеберс А.О. *Магнитные жидкости*. Рига: Зинатне, 1989. 387 с.
 [2] Духин С.С. *Электропр-сть и электрокинетические свойства дисперсных систем*. Киев: Наукова думка, 1975. 246 с.
 [3] Диканский Ю.И., Вегера Ж.Г., Смерек Ю.Л., Аксенов А.В. Особенности электропроводности и теплопроводности магнитного нанокolloида с мелкодисперсным немагнитным наполнителем // *Нанотехника*. 2009. – № 18. – С. 20–24.
 [4] Закинян Р.Г., Смерек Ю.Л., Закинян А.Р. К механизму электропроводности магнитной жидкости с графитовым наполнителем // *Известия вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки*. 2004. – № 3. С. 52–55.
 [5] Гиндин Л.Г., Френкель Я.И., Шпанская О.А. Образование проводящих «мостиков» в суспензиях проводников или полупроводников в диэлектриках // *Журнал технической физики*. 1950. – Т. 20, – вып. 8. – С. 937–943.

Автоматизированные исследования температурных зависимостей скоростей упругих волн и затухания звука в монокристаллах KPb_2Br_5 и $RbPb_2Br_5$ и керамиках $BaTi_{1-x}Zr_xO_3$

Нестеров Александр Евгеньевич¹

Рычков Илья Михайлович¹, Токарев Николай Андреевич¹, Пашков Виктор Михайлович²

¹*Институт инженерной физики и радиоэлектроники СФУ*

²*Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН*

Турчин Павел Петрович¹, к.ф.-м.н.

Krsk-nes@mail.ru

Исследования распространения акустических волн в твердых телах дают наиболее точные значения упругих констант и их изменений при различных термодинамических условиях. Современные акустические экспериментальные методы и установки предполагают автоматизированные измерительные схемы, что во многом упрощает рутинные измерения температурных и других зависимостей, а также позволяет повысить чувствительность самих методов. Последнее является необходимым условием при изучении материалов с высоким затуханием звука, к которым относятся керамики $BaTi_{1-x}Zr_xO_3$. Прецизионность управления температурными режимами измерений требуется и при изучении температурных изменений упругих постоянных особенно таких материалов как сегнетоэластики с высокими значениями коэффициентов теплового расширения (монокристаллы KPb_2Br_5 и $RbPb_2Br_5$).

В работе исследуются возможности повышения точности и чувствительности автоматизированных акустических измерений различными методами. В основу измерительных схем положена блок-схема автоматизированного ультразвукового метода [1]. Исследованы точность измерения скоростей упругих волн импульсно-фазовым методом [2,3], и реализованными методами длинного импульса (рис.1) и Вильямса-Лэмба (рис.2)

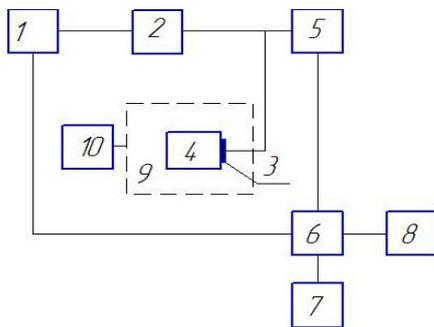


рис.1. Блок-схема автоматизированного метода длинного импульса. 1 – задающий генератор AFG 3252, 2 – усилитель мощности, 3 – пьезопреобразователь, 4 – образец, 5 – ограничитель – усилитель сигнала, 6 – осциллограф DPO 72004, 7 – рубидиевый стандарт частоты FS725, 8 – персональный компьютер, 9 – термостат, 10 – ПИД-регулятор ИТС503

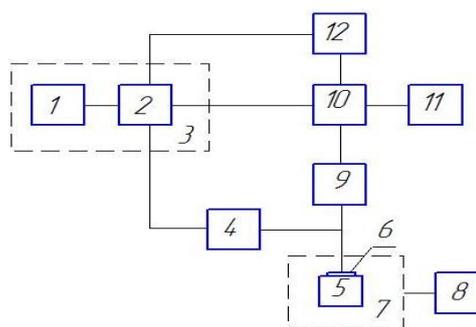


рис.2. Блок-схема автоматизированного метода Вильямса – Лэмба. 1 – персональный компьютер, 2 – генератор PXI 5422, 3 – шасси PXI-1044, 4 – усилитель мощности 5 – образец, 6 – пьезопреобразователь, 7 – термостат Optistat DNV, 8 – ПИД – регулятор, 9 – ограничитель-усилитель сигнала, 10 – осциллограф DPO 72004, 11 – персональный компьютер, 12 – рубидиевый стандарт частоты FS725

Импульсным ультразвуковым методом [1] на частоте 30МГц получены температурные зависимости скоростей упругих волн в сегнетоэлектриках релаксорах $\text{BaTi}_{1-x}\text{Zr}_x\text{O}_3$ и сегнетоэластиках KPr_2Br_5 и RbPr_2Br_5 и затухания звука α в них. Обнаружено аномальное температурное поведение скоростей продольной и сдвиговой объемных акустических волн (ОАВ) в керамиках с $x=0,3$, что коррелирует с зависимостью $\alpha(T)$. Для различных акустических мод монокристаллов KPr_2Br_5 и RbPr_2Br_5 установлены температурные коэффициенты скоростей ОАВ.

Работа выполнена при поддержке Междисциплинарного проекта СО РАН №28 и при поддержке гранта Президента РФ НШ-4828.2012.2.

Список публикаций:

- [1] П.П.Турчин, А.А. Парфенов, Н.А. Токарев, А.Е. Нестеров, А.Ю. Тарасова, К.С. Александров, Импульсные автоматизированные измерения скоростей упругих волн в кристаллах, Ползуновский вестник №3/1, 2011.- С. 143-147.
 [2] P.P. Turchin [and others], The frequency dependences of velocities and attenuations of elastic waves in heterogeneity mediums examination, Proc. of "2007 IEEE Int. Ultrasonics Symposium", USA, New York. - 2007. P. 1637-1640.
 [3] П.П.Турчин, А.А. Парфенов, А.Е. Нестеров, Н.А. Токарев, К.С. Александров, Автоматизированные исследования распространения акустических волн в твердых телах импульсными методами, Сборник трудов научной конференции «Сессия научного совета РАН по акустике и 19 сессия российского акустического общества», Саратов, 2011.- Т.1.- С.100-104.

Влияние нанокристаллизации на термоэлектрические свойства пленок на основе Cr-Si

Новиков Сергей Валерьевич

Бурков Александр Трофимович, Шумани Иохим*

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

Лейбниц институт физики твердого тела и материаловедения, Дрезден, Германия*

Бурков Александр Трофимович, д.ф.-м.н.

S.Novikov@mail.ioffe.ru

Силициды металлов рассматриваются как перспективные термоэлектрические материалы, имеющие высокие значения термоэлектрической эффективности (Z) (1), т.е. способности преобразовывать тепловую энергию в электрическую [1-6].

$$Z = \frac{S^2}{\rho \cdot \kappa} \sim \eta, \quad (1)$$

где η – КПД преобразования, S - термоэдс, ρ - удельное сопротивление, κ – теплопроводность.

Такие материалы, в том числе и соединения на основе Cr-Si, обладают рядом достоинств. Они совместимы с кремниевой технологией, экологичны, термически стабильны, безопасны для человека. Стехиометрическое соединение CrSi_2 является полупроводником с шириной запрещенной зоны $E_g \approx 0.4$ эВ и хорошей подвижностью носителей заряда [7,8]. Ширина запрещенной зоны этого соединения позволяет использовать его как среднетемпературный (300 – 800 К) термоэлектрический материал.

Изучение возможности повышения термоэлектрической эффективности в объемных материалах за счет изменения уровня легирования и состава ведется уже очень давно. Однако значительных успехов добиться пока не удалось. Поэтому ведутся поиски иных способов повышения эффективности. Наноструктурирование рассматривается в качестве одного из наиболее перспективных путей увеличения значений Z . Одним из видов наноструктурированных материалов являются нанокристаллические (НК) материалы.

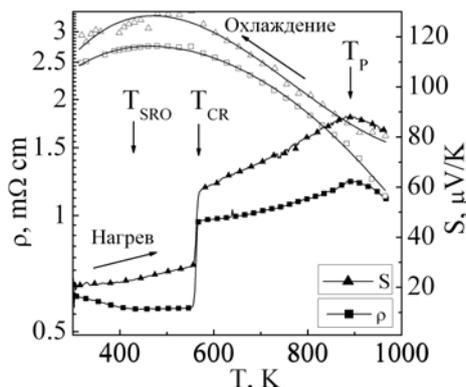


рис.1. Температурные зависимости удельного сопротивления (ρ)и термоэдс (S) тонкой пленки $\text{Cr}_{0,28}\text{Si}_{0,72}$.

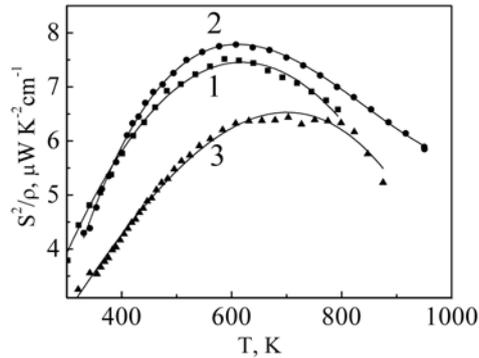


рис.2. Зависимости фактора мощности (S^2/ρ) тонкой пленки CrSi_2 в ходе циклического отжига. 1 – отжиг при 793 K выдержка 300 часов; 2 – отжиг при 950 K выдержка 30 часов; 3 – отжиг 10 минут при 1100 K.

В обычных поликристаллических образцах (с размером кристаллов порядка 1 мкм и больше) уменьшение теплопроводности, связанное с рассеянием фононов на кристаллических границах, компенсируется увеличением электрического сопротивления, за счет рассеяния носителей заряда на этих же границах. При этом термоэдс в поликристаллических образцах не зависит от размера кристаллических зерен. Предполагается, что в НК материалах 2 основных фактора могут привести к повышению Z: 1. Уменьшение решеточной теплопроводности за счет рассеяния фононов на структурных неоднородностях; 2. Увеличение S в результате селективного рассеяния носителей заряда на границах нанокристаллов.

В данной работе исследуются процессы кристаллизации аморфных пленок и перехода их в нанокристаллическое состояние. В ходе термического воздействия (300 K – 1000 K) *in-situ* измерялись значения электрического сопротивления (ρ) и термоэдс (S). Аморфные пленки были получены магнетронным распылением и осаждением на холодную Si/SiO₂ подложку. Толщины исследуемых пленок ~ 100 нм. В работе изучались пленки 4-х составов: $\text{Cr}_{0.35}\text{Si}_{0.65}$, $\text{Cr}_{0.33}\text{Si}_{0.67}$, $\text{Cr}_{0.28}\text{Si}_{0.72}$, $\text{Cr}_{0.15}\text{Si}_{0.85}$. $\text{Cr}_{0.33}\text{Si}_{0.67}$ (CrSi_2) является стехиометрическим, таким образом, изучались пленки как с избытком Si так и металла.

Было установлено, что в процессе отжига пленки всех составов проходят несколько стадий: аморфное состояние (300 - T_{SRO}); аморфное состояние с измененным ближним порядком ($T_{\text{SRO}} - T_{\text{CR}}$), электрически изолированное НК состояние в аморфной матрице ($T > T_{\text{CR}}$); образование перколяционного НК кластера (T_{P}); поликристаллическое состояние ($T > 1100$ K) (рис.1.) В зависимости от начального состава, пленки переходили в однофазное или многофазное НК состояние со средним размером зерна от 10 до 20 нм [10]. В ходе отжига размер НК кристаллитов не изменялся, лишь увеличивалось их количество.

Данные температурных зависимостей фактора мощности (S^2/ρ) в ходе циклического отжига пленки CrSi_2 показывают, что фактор мощности у НК пленки (кривые 1,2) имеет более высокие значения, чем у поликристаллической (кривая 3) (рис.2.). Увеличение фактора мощности связано с более высокой термоэдс НК пленки по сравнению с термоэдс поликристаллической. Учитывая, что теплопроводность НК структур ниже, чем у поликристаллических, можно ожидать выигрыш в эффективности см. (1) [11,12].

Список публикаций:

- [1] Воронов Б. К., Дудкин Л. Д., Трусова Н. Н. //Химическая связь в полупроводниках: Изд-во Наука и техника 1969.
- [2] J.-J. Gu, M.-W. Oh, H. Inui, and D. Zhang. *Phys. Rev. B*, 71(113201), 2005.
- [3] M.I. Fedorov and V.K. Zaitsev. In D.M. Rowe, editor, *Thermoelectrics Handbook Macro to Nano*. CRC Press, 2006.
- [4] Y. Arita, S. Mitsuda, and T. Matsui. *J. Therm. Anal. Cal.*, 69(3):821-830, 2002.
- [5] T. Tokiai, T. Uesugi, A. Nosaka, M. and Hirayama, K. Ito, and K Koumoto. *J. Mater. Sci.*, 32(11):3007-3011, 1997.
- [6] Дмитриев А. В., Звягин И. П. // Успехи физических наук 2010. Т. 180 №8. С. 821.
- [7] A.V. Filonov, I.E. Tralle, N.N. Dorozhkin, and et al. *Phys. Stat. Sol. A.*, 186:209-215, 1994.
- [8] Кривошеева А. В., Шапошников В.Л., Кривошеев А.Е., Филонов А. Б., Борисенко В. Е. // ФТП. 2003. Т.37. С.402-407
- [9] L.D. Hicks, M.S. Dresselhaus. *Phys. Rev. B* 47, 12727 (1993).
- [10] A.T. Burkov, H.Vinzelberg, J.Schumann, T.Nakama, K.Yagasaki *J. Appl. Phys.* 95, 3229 (2001).
- [11] Bed Poudel, et al. *Science* 320, 634 (2008).
- [12] C. Dames, G. Chen.. In D.M. Rowe, editor, *Thermoelectrics Handbook Macro to Nano*. CRC Press, 2006.

Спиновый переход в соединении LaCoO₃
Новоселов Дмитрий Юрьевич
 Коротин Дмитрий Михайлович, Скорняков Сергей Львович
 Институт физики металлов УрО РАН
 Анисимов Владимир Ильич, д.ф.-м.н.
novoselov@imp.uran.ru

Более 50 лет остается открытым вопрос о реализации в LaCoO₃ того или иного сценария магнитного перехода между низкоспиновым (LS), промежуточным (IS) и высокоспиновым состояниями (HS) [1, 2, 3]. Сложность этого явления для LaCoO₃ заключается в одновременном действии трех взаимосвязанных механизмов, оказывающих влияние на степень расщепления энергетических уровней атомных 3d-орбиталей Co и распределение электронов на них. Во-первых, расщепление энергетических уровней кристаллическим полем, во-вторых, обменное взаимодействие между электронами на e_g-орбиталях Co и, в-третьих, сильная гибридизация e_g-орбиталей Co с 2p-орбиталями O. На рисунке 1 (а) изображены три возможные спиновые конфигурации, которые могут реализовываться в LaCoO₃.

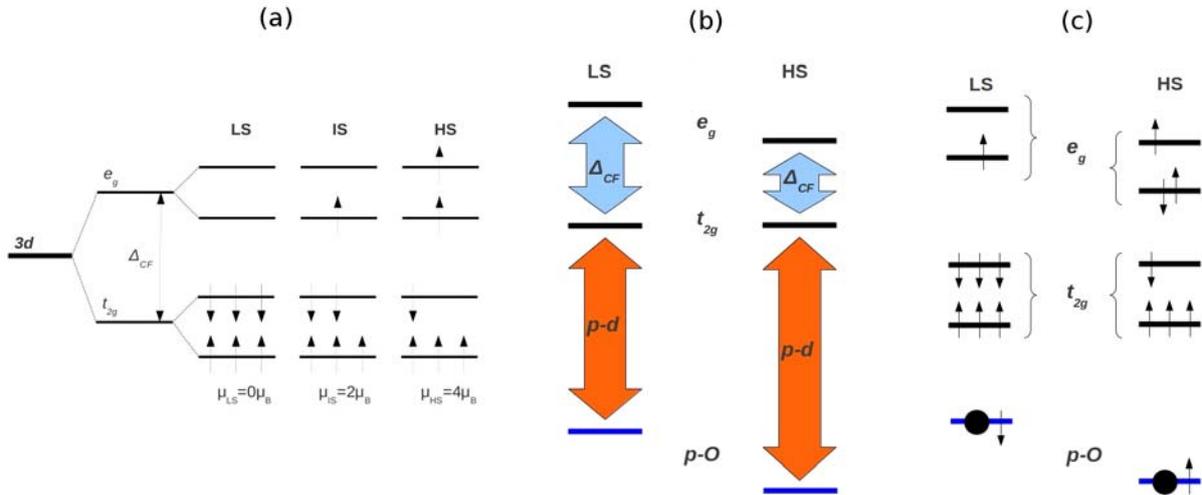


рис.1. Возможные конфигурации спиновых состояний LaCoO₃ (а) и схематическое изображение влияния гибридизации между p и d состояниями на заполнение электронных оболочек (d, c), LS — низкоспиновое, IS — промежуточностиновое, HS — высокоспиновое состояние, Δ_{CF} — кристаллическое поле. (b) — относительное положение энергетических зон, (c) — расположение электронов по энергетическим уровням. Черная точка обозначает электронную дырку на p-орбитали, из которой электрон перешел на d-орбиталь. Стрелками обозначены направления спиновых моментов.

В ходе работы было проведено моделирование и выполнены расчеты электронной структуры и магнитных свойств данного соединения методом LDA+DMFT, объединяющем теорию функционала электронной плотности и теорию динамического среднего поля с использованием алгоритма квантового Монте-Карло с непрерывным временем (CT-QMC) для решения примесной задачи [4, 5].

Для учета влияния гибридизации между p-состояниями O и d-состояниями Co поправка на двойной учет кулоновского взаимодействия в методе LDA+DMFT вычислялась как

$$DC = U_d(n_d - 1/2) - U_p/2, \quad (1)$$

где U_d и U_p — величина кулоновского взаимодействия на d- и p-орбиталях, n_p — заселенность d-орбитали.

Полученное значение U_p хорошо согласуется с оценками сделанными ранее и составляет 3,6 эВ [6, 7].

Расчеты проводились для кристаллических структур, соответствующих температурам T=5K и T=700K [8]. Было обнаружено, что при T=5K ионы Co находятся в немагнитном низко-спиновом состоянии с магнитным моментом 0,96 μ_B. Для T=700K расчеты показали наличие высоко-спинового состояния с суммарным магнитным моментом 3,53 μ_B. Отличие наблюдаемого момента от нуля для низко-спинового состояния и от 4 μ_B для высоко-спинового обусловлено наличием сильной гибридизации между e_g и p орбиталями. Этот эффект схематически представлен на рисунке 1 (c), из которого видно, что реальные заселенности орбиталей отличаются от формальных за счет перехода части электронной плотности с 2p-орбитали кислорода на 3d-орбиталь кобальта.

Плотности электронных состояний, полученные в ходе работы, представлены на рисунке 2. При $T=5\text{K}$ (рис. 2b) t_{2g} орбиталь является полностью заселенной, а e_g практически пустая, что интерпретируется как низкоспиновое состояние системы. При $T=700\text{K}$ (рис. 2d) на орбитали e_{2g} заселенность возрастает, а на t_{2g} наоборот уменьшается, что с учетом принципа Паули приводит к возрастанию суммарного спина и соответственно образованию высоко-спинового состояния иона Co.

Результаты расчетов подтверждены экспериментальными данными, в которых наблюдается реализация сценария LS-HS [3].

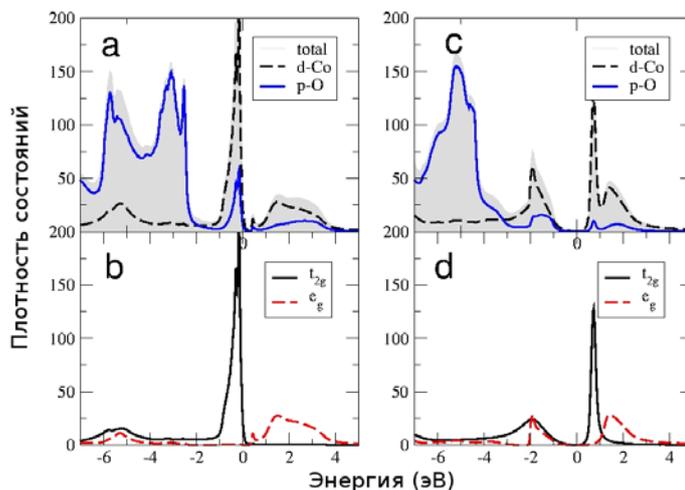


рис.2. Графики плотностей электронных состояний для $T=5\text{K}$ (a, b) и $T=700\text{K}$ (c, d) в LaCoO_3 . Нулевое значение энергии соответствует уровню Ферми.

Таким образом, в данной работе было показано, что температурный магнитный переход в соединении LaCoO_3 сопровождается переходом из немагнитного низкоспинового в магнитное высокоспиновое состояние за счет постепенного заселения e_g -орбитали Co.

Список публикаций:

- [1] B. Goodenough, *Phys. Rev.* 155, 932 (1967).
- [2] M. A. Korotin, S. Yu. Ezhov, I. V. Solovyev, and V. I. Anisimov, *Phys. Rev. B* 54, 8 (1996).
- [3] M. W. Haverkort et al., *PRL* 97, 176405 (2006).
- [4] A. Georges et al., *Rev. Mod. Phys.* 68, 1 (1996).
- [5] E. Gull et al., *Rev. Mod. Phys.* 83, 2 (2011).
- [6] V. I. Anisimov and A. V. Kozhevnikov, *Phys. Rev. B* 72, 075125 (2005).
- [7] Mark S. Hybertsen et al., *Phys. Rev. B* 41, 16 (1990).
- [8] P. G. Radaelli and S.-W. Cheong, *Phys. Rev. B* 66, 094408 (2002).

Воздействие ионизации примесей на проводимость графена

Носаева Татьяна Александровна

Волгоградский государственный социально-педагогический университет

Крючков Сергей Викторович, д.ф.-м.н.

nosaeva.ta@gmail.com

В данной работе в рамках квазиклассического подхода вычислена статическая проводимость графена на подложке карбида кремния с учетом ионизации примесей. Получена пороговая зависимость плотности тока от напряженности электрического поля.

Графен представляет собой одиночный слой атомов углерода. По электронным свойствам графен относится к полуметаллам [1], однако за счёт взаимодействия с подложкой графен может приобретать свойства полупроводника. В частности, запрещённой зоной с полушириной $\Delta = 0.26\text{eV}$ обладает спектр образца на подложке карбида кремния SiC [2].

Известно (например, [4]), что наличие примесей может кардинально модифицировать транспортные свойства материала. В связи с этим представляет интерес задача о нахождении проводимости графена в постоянном электрическом поле с учетом ионизации примесей.

Спектр графена на подложке *SiC* имеет вид:

$$\varepsilon = \sqrt{v_f^2 p^2 + \Delta^2} \quad (1)$$

На рисунке 1 представлена энергетическая диаграмма расположения примеси между энергетическими уровнями. Здесь $E(np.)$ - минимальная энергия электрона в зоне проводимости, $E(вал.)$ - максимальная энергия электрона в валентной зоне, V - энергия примеси. Начало отсчёта энергии выбираем посередине запрещённой зоны. Электрическое поле \vec{E} направлено вдоль оси x .

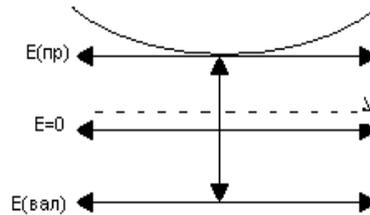


рис. 1. Энергетическая диаграмма расположения примеси.

Будем решать задачу, используя метод кинетического уравнения Больцмана с модельным интегралом столкновений Батнагара-Гросса-Крука (БКГ) [3].

$$\frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial t} + e\vec{E} \frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial \vec{p}} = \left(\frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial t} \right)_{cm} - R(\vec{p}) + G(\vec{p}) \quad (2)$$

Здесь $R(\vec{p})$ и $G(\vec{p})$ - соответственно член рекомбинации и генерации носителей тока в зоне проводимости. Выражение плотности тока имеет вид:

$$j(t) = j_0 n \int_{-\infty}^0 dt \cdot \exp(t) \int_0^{\infty} q \cdot dq \cdot \exp\left(-\frac{\Delta}{T} \sqrt{1+q^2}\right) \left[\frac{(1+q^2 - F^2 t^2) K(\xi) - (1+(q+ Ft)^2) E(\xi)}{Ft \sqrt{1+(q+ Ft)^2}} \right] \quad (3)$$

Здесь $\xi = 4Ftq / (1+(q+ Ft)^2)$, $F = eEv_f / (\Delta v)$, $j_0 = \frac{2ev_f}{\pi l}$, $I = \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{\Delta}{T} \sqrt{1+x}\right) dx$, $E(\xi)$ и

$K(\xi)$ - полные эллиптические интегралы соответственно первого и второго рода, n - концентрация носителей тока, зависящая от поля, ν - средняя частота столкновений.

График зависимости плотности тока от напряженности эллиптического поля представлен на рисунке 2. Кривая 1 на рисунке соответствует плотности тока в отсутствие примесей, кривая 2 - график плотности тока, рассчитанной с учетом ионизации примесей под действием электрического поля при условии равенства концентрации примесей N и равновесной концентрации носителей заряда n_0 .

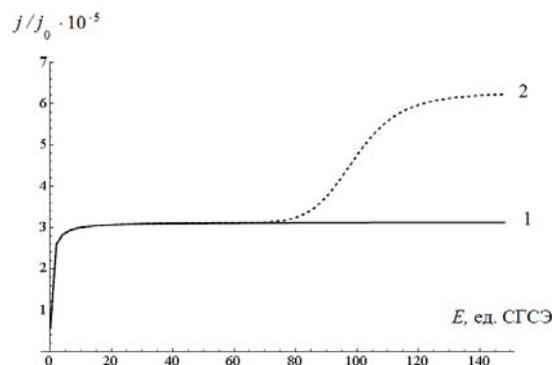


рис. 2. Зависимость плотности тока от напряженности постоянного электрического поля.

Отметим, что ионизация примесей начинается при довольно сильных полях (десятки единиц СГСЭ), при которых необходимо использовать выражение для энергетического спектра в более точной форме, чем (1), однако качественно рассмотренный эффект должен сохраняться. При температуре порядка $T = 70\text{K}$, концентрации $n_0 = 10^{10}\text{cm}^{-2}$ плотность тока составляет порядка $j = 10^{-5}\text{A/cm}$.

Работа поддержана государственным научным грантом Волгоградской области.

Список публикаций:

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al., *Science*, 306, 666 (2004).
- [2] S. Y. Zhou, G.-H. Gweon, A. V. Fedorov et al., *Nature Materials*, 6, 770, (2007).
- [3] А.Ф. Александров, Л.С. Богданкевич, А.А. Рухадзе, *Основы электродинамики плазмы*, М.: Высшая школа, 1988. – 424 с.
- [4] Д.В. Завьялов, С.В. Крючков, Н.Е. Мещерякова, *Поглощение кноидальных электромагнитных волн электронами сверхрешетки в процессе ионизации примесей, Оптика и спектроскопия*. – 2004. – Т.96. – N1. – С.71-73.

Эффекты старения и морфология пористых стёкол, содержащих внедрённые материалы.

Овсяников Александр Константинович

Боркунов Родион Юрьевич

Балтийский федеральный университет имени Иммануила Канта

Никулин Николай Михайлович к.ф.-м.н.

ovsyanikov_a_k@mail.ru

Изучение свойств хорошо известных классических материалов, находящихся в условиях искусственно ограниченной геометрии, важны и для фундаментальной науки, поскольку их основные физические свойства претерпевают значительные изменения по сравнению с массивными материалами. В то же время практически не изучен вопрос о процессах старения подобных нанокompозитных материалов (НКМ) что немаловажно для практического использования НКМ, и не исследовано возможное изменение распределения внедренного материала по объему пористой матрицы в условиях длительного хранения. Решению именно этих задач и посвящена данная работа, в которой представлены результаты исследований НКМ на основе пористых боросиликатных стекол, в поры которых были введены легкоплавкий металл (Sn), сегнетоэлектрик NaNO_2 и диэлектрик NaNO_3 . В работе исследована морфология поверхностей данных НКМ после приготовления и спустя полгода и разработан метод визуализации объёмного распределения внедрённого материала в этих образцах.

Все образцы НКМ были получены на основе 3 типов матриц из пористого стекла, в которых поры образовывали случайную трехмерную систему взаимосвязанных сплошных (т.е. выходящих на поверхность) каналов со средними диаметрами каналов 7 нм, 46 нм, 320 нм. Средний диаметр каналов определялся по данным ртутной порометрии. Металл в пористые стекла вводился из расплава под высоким давлением, степень заполнения составляла порядка 90% от общего объема пор. NaNO_2 вводился из расплава в условиях вакуума, а NaNO_3 - из водных растворов за несколько циклов, при этом заполняемость пор достигала 40 -50%. Исследования проводились на растровом электронном микроскопе JSM 6390 LV (JEOL, Япония) с разрешением 7 нм и на Оже-микроанализаторе JAMP – 9500F (JEOL, Япония) с применением режима травления поверхности ионами аргона с энергией $E=500\text{эВ}$.

Для образцов с внедренными NaNO_2 и NaNO_3 исследования кристаллической структуры показали отсутствие макроскопических кристаллитов. Проведенные спустя полгода исследования поверхности показали, что как для образцов с NaNO_2 (введенным из расплава), так и для пористых стекол с NaNO_3 (введенным из водного раствора) на поверхности образуются макроскопические кластеры (кристаллиты) с характерным размером 28 мкм для стекол с NaNO_2 и хорошо структурированные кристаллиты с характерным размером около 100 мкм для стекол с NaNO_3 (рис.1). Образование таких макроскопических структурированных агломератов может быть вызвано выходом материала из пор. Проведенные повторные исследования еще через полгода хранения образцов при тех же условиях показали, что изменение морфологии поверхности является динамическим процессом: для стекла с NaNO_2 произошло разрушение крупных кластеров и разбиение их на существенно более мелкие. Размер кластеров уменьшился в 5-10 раз. Ситуация со стеклами, содержащими нитрат натрия (NaNO_3), более интересная. Помимо разрушения крупных кристаллитов наблюдается на отдельных участках этой же поверхности образца рост нитевидных кристаллов со средним диаметром порядка 1 мкм.

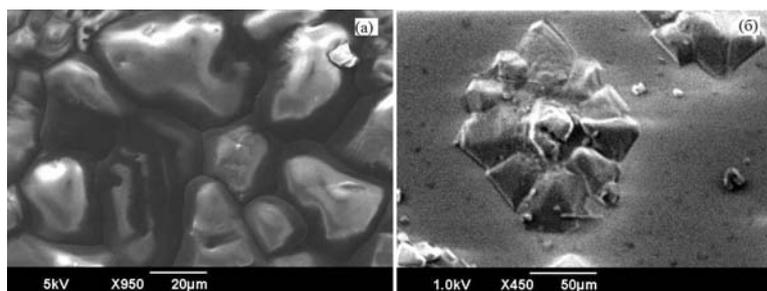


рис 1. Кластеры на поверхности образца с NaNO_2 в порах (слева) и кристаллы на поверхности образца с NaNO_3 в порах (справа).

Пространственное распределение атомов легкоплавкого металла по глубине образца для пористых стекол со средним диаметром пор 7 нм, заполненных Sn, было проведено на Оже-микроанализаторе. Травление происходило с помощью пучка ионов аргона ($E=500$ эВ), при этом скорость травления матрицы составляла (28-40) нм/мин, а скорость травления внедрённого олова - 13 нм/мин. В результате, из-за различия скоростей травления, матрица разрушалась быстрее, что позволило визуализировать распределение металла в порах в объеме образца (рис.2).

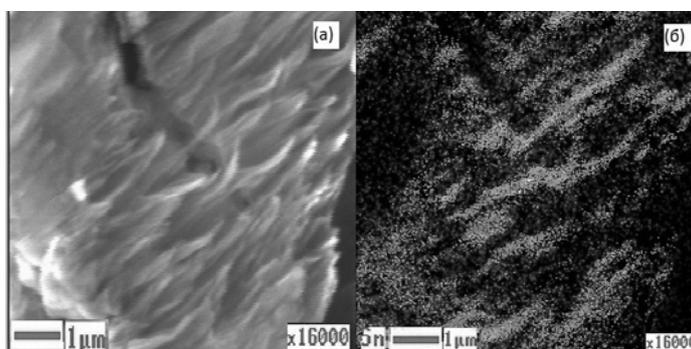


рис.2. Скан поверхности образца после травления (а) и карта распределения олова на поверхности (б) переход от черного цвета к светлому соответствует увеличению концентрации Sn.

Очевидно, что данный метод визуализации содержимого пор может быть применён и для других материалов с меньшими скоростями ионного травления по сравнению со скоростью травления матрицы.

Мессбауэровское исследование микросфер энергетических зол

Осетров Евгений Игоревич

Плетнев Олег Николаевич

Сибирский федеральный университет

Баюков Олег Артемьевич, д.ф.-м.н.

evgeniy-osetrov@mail.ru

Метан - природный газ, сопутствующий нефтедобыче, обычно сжигается. Перспективный вариант утилизации – производство этилена, одного из основных продуктов органического синтеза. Этилен - продукт реакции окислительной конденсации метана, которая достигается при наличии эффективного катализатора. В Институте химии и химических технологий СО РАН было обнаружено, что некоторые микросферы энергетических зол оказываются активными в реакции димеризации метана.

Микросферы – это компоненты летучих зол – продуктов сжигания углей на тепловых электростанциях. Для исследования были отобраны 19 фракций зол углей различных месторождений: Экибастузского (серия Е, содержание 25.4-49.9 вес.% Fe), Новокузнецкого (серия Р, 26.2-46.5 вес.% Fe), Тунгуйского (серия В, 53.4-55.4 вес.% Fe), Березовского (серия S, 59.6-64.8 вес.% Fe).

Мессбауэровские измерения ферросфер проведены при комнатной температуре на спектрометре MS-1104Em с источником $\text{Co}57(\text{Cr})$. Расшифровка спектров проведена в два этапа. На первом этапе определены распределения вероятности сверхтонких полей (H) для секстетов и квадрупольных расщеплений (QS) для дублетов для трех валентных состояний железа, Fe^{3+} , $\text{Fe}^{2.5+}$ и Fe^{2+} . На основе этой информации формировался модельный спектр. На втором этапе модельный спектр подгонялся к экспериментальному спектру при варьировании всего набора параметров сверхтонкой структуры. В ферросферах обнаружены три

кристаллографические фазы: алюмосиликатное стекло, гематит и шпинель. Известно, что стехиометричные гематит и магнетит приводят к глубокому окислению метана. Что же служит причиной катализа в нашем случае?

Гематит идентифицируется по характерным для секстета параметрам ($IS \sim 0.38 \text{ мм/с}$, $H \sim 515 \text{ кЭ}$ и $QS \sim 0.38 \text{ мм/с}$). Магнетит - по наличию железа смешанной валентности ($Fe^{2.5+}$). Парамагнитные части спектра приписываем железу, находящемуся в алюмосиликатном стекле.

Позиции $Fe^{3+}(A+B)$ характерны для стехиометричного магнетита и представляет собой катионы трехвалентного железа, занимающие тетраэдрические и октаэдрические позиции, секстеты которых не разрешаются. Параметры этих позиций $IS=0.3 \text{ мм/с}$ и $H=490 \text{ кЭ}$.

Позиции $Fe^{2.5+}(B)$, характерные для стехиометричного магнетита, имеют параметры $IS=0.66 \text{ мм/с}$ и $H=460 \text{ кЭ}$.

Позиции Fe^{v2+} и Fe^{v3+} возникают при локализации электрона быстрого обмена на одном из этих катионов при появлении катионной вакансии среди ближайших соседей. Параметры этих позиций $IS=0.68-0.72 \text{ мм/с}$, $H=420-440 \text{ кЭ}$ и $IS=0.38-0.55 \text{ мм/с}$, $H=460-480 \text{ кЭ}$, соответственно.

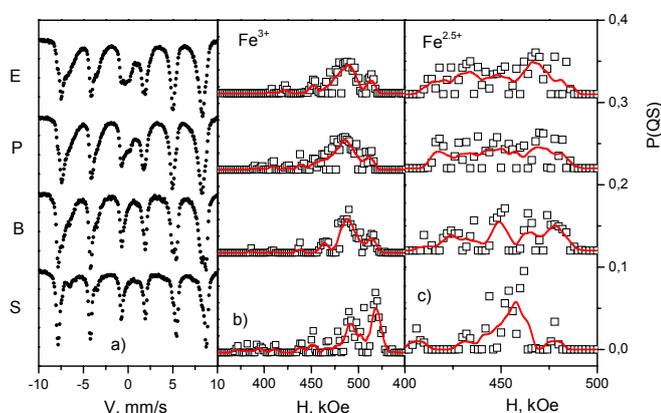
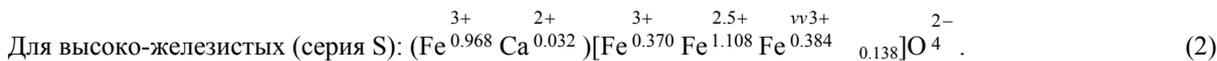
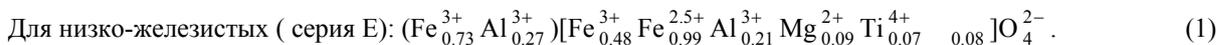


рис.1. а) Мессбауэровские спектры фракций $(-0.1+0.063)$ серий E, P, B и S ферросфер до катализа; б) распределение вероятностей для Fe^{3+} ; в) распределение вероятностей для $Fe^{2.5+}$

Позиция $Fe^{vv2.5+}$ с параметрами $IS=0.64 \text{ мм/с}$ и $H=410 \text{ кЭ}$ имеет среди соседей диамагнитный тетраэдрический катион типа Mg и октаэдрическую катионную вакансию. Быстрый электронный обмен не разрушается.

Позиция Fe^{vv3+} с параметрами $IS=0.36-0.50 \text{ мм/с}$ и $H=370-420 \text{ кЭ}$ имеет среди соседей диамагнитный тетраэдрический катион большого радиуса типа Ca и октаэдрическую катионную вакансию. Электрон быстрого обмена локализован на кислороде.

Мессбауэровские результаты позволяют оценить формулы шпинели.



Позиции Fe^{vv3+} обнаруживаются только в высоко-железистых ферросферах серии S. В этой серии, в отличие от остальных, согласно данным химического анализа, присутствует заметное количество Ca, порядка 9%. В решетке он занимает тетраэдрические позиции. Наличие катионной вакансии и Ca, имеющего большой ионный радиус, может приводить к дефициту электрона на кислороде. Такой кислорода $[O^{1-}]$, связанный с решеткой, способен отрывать водород от молекулы метана. Следовательно, наличие Ca и катионной вакансии можно считать спутниками активных центров.

Изменения структуры при фазовых переходах, критические и не критические параметры порядка в эльпасолите Cs₂RbDyF₆

Осокина Лилия Витальевна

Сибирский федеральный университет

Мисюль Сергей Валентинович, Молокеев Максим Сергеевич

Osokina.lily@gmail.com

Соединение Cs₂RbDyF₆ в высокотемпературной фазе имеет кубическую симметрию с пространственной группой Fm3m (Z=4) и относится к семейству эльпасолита. Последовательность фазовых переходов (ФП) в кристалле Cs₂RbDyF₆ исследовалась ранее в работах [1, 2] поляризационно-оптическим, калориметрическим и рентгеновским методами. В [1, 2] было установлено, что Cs₂RbDyF₆ при понижении температуры испытывает последовательность из трёх ФП в сегнетоэластические состояния при температурах, 251 К, 205 К и 196 К, изменение симметрии и искажения при которых можно представить символически в виде Fm3m→I4/m→I2/m→P2₁/n. Однако, вывод о виде искажений при ФП в [2] был получен по косвенным данным – температурному поведению параметров кристаллической ячейки. Для ответа на вопрос об искажениях кристалла при ФП необходимо прямое определение структур искажённых фаз. В настоящей работе представлены результаты определения структур двух фаз Cs₂RbDyF₆, исходной кубической и самой низкосимметричной моноклинной, по рентгеновскому эксперименту от порошкового образца.

Рентгенограммы от поликристаллического образца Cs₂RbDyF₆ получены с использованием температурной камеры ТТК-450 ANTONPAAR, установленной на рентгеновском дифрактометре D8-ADVANCE (Cu-Kα – излучение, θ-2θ сканирование, линейный детектор VANTEC). В качестве хладагента применялся жидкий азот. Шаг сканирования по углу 2θ равен 0.016°, экспозиция в каждой точке 3 секунды. Рентгенограммы исходной кубической и искажённой моноклинной фазы отсняты в двух температурных точках 293 К и 130 К.

Уточнение профильных и структурных параметров Cs₂RbDyF₆ в кубической и моноклинной фазах проводилось методом полнопрофильной обработки рентгенограмм, реализованной в программе DDM [3, 4]. Результаты уточнения приведены в таблице.

Координаты и изотропные тепловые параметры ионов кристалла Cs₂RbDyF₆ кубической и моноклинной фаз

Пр. группа Параметры ячейки R-DDM		Fm3m a=9.6592(36) Å (T=293 K) 2.4%			
Атом	Позиция	x/a	y/b	z/c	B _{iso} (Å ²)
Cs	4b	0	0	0.5	0.0220
Rb	4a	0	0	0	0.0152
Dy	8c	0.25	0.25	0.25	0.0395
F	24e	0.23000	0	0	0.0860
Пр. группа Параметры ячейки R-DDM R _B		P2 ₁ /n a=6.8072(8) Å, b=6.8012(9) Å, c=9.6379(18) Å, β=90.36(1)° (T=130 K) 11.83% 4.84%			
Атом	Позиция	x/a	y/b	z/c	B _{iso} (Å ²)
Rb	2b	0	0	0.5	0.0080(3 8)
Cs	4e	0.4965(18)	0.0094(7)	-0.2492(23)	0.0162(2 1)
Dy	2a	0	0	0	0.0043(2 3)
F ₁	4e	-0.103(6)	-0.009(7)	-0.209(6)	0.0127
F ₂	4e	0.267(13)	0.225(13)	-0.002(12)	0.0127
F ₃	4e	0.217(9)	-0.193(14)	-0.052(10)	0.0127

Примечания. R_{DDM} – профильный фактор недостоверности, определяемый программой DDM [3, 4]

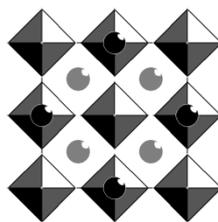


рис.1. Структура исходной кубической фазы Cs_2RbDyF_6 при температуре 293 К. Проекция вдоль оси четвертого порядка. Полиэдры – октаэдры DyF_6 , чёрные шарики – ионы Rb , серые шарики – ионы Cs

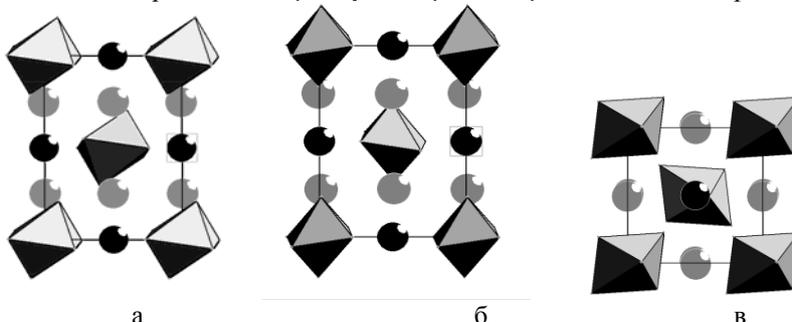


рис.2. Структура моноклинной фазы Cs_2RbDyF_6 при температуре 130 К: а, б, в - проекции вдоль осей моноклинной ячейки а, b, с, соответственно

Анализ искажений структуры и отнесение искажений к критическим и некритическим параметрам переходов проведено, опираясь на работы по теоретико-групповому анализу структурных ФП в кристаллах с пространственной группой $Fm\bar{3}m$ [5, 6].

Проведённый анализ и уточнённая структура самой низкотемпературной искажённой фазы убедительно доказывают, что критическими искажениями исходной кубической эльпасолитной структуры Cs_2RbDyF_6 являются повороты типа ϕ и ψ октаэдрических групп DyF_6 (см.рис.1, 2), которые преобразуются по критическим неприводимым представлениям (НП) группы $Fm\bar{3}m$ 11-9(Γ_4^+) и 10-3(X_3^+). Однако, для объяснения совокупности экспериментальных данных необходим учёт некритических смещений ионов. С указанными критическими НП связаны некритические НП 11-5(Γ_3^+) и 11-7(Γ_5^+), приводящие к искажениям октаэдров DyF_6 и смещениям ионов Cs .

Список публикаций:

- [1] Горев М. В., Искорнев И. М., Ком Л. А., Мисюль С. В., Флеров И. Н. // ФТТ. 1985. Т. 27. В.6. С.1723.
- [2] Aleksandrov K. S., Melnikova S. V., Misjul S. V. // Phys. stat. sol.(a). 1987. V.104. P.545.
- [3] Solovyov L. A. // J. Applied Crystallogr. 2004. V.37. P.1.
- [4] Solovyov L. A., Astachov A. M., Molokeev M. S., Vasiliev A. D. // Acta Crystallogr. 2005. V. B61. P.435.
- [5] Мисюль С. В. // Кристаллография. 1984. Т. 29. №5. С.941.
- [6] Aleksandrov K. S., Misyul S. V., Baturinets E. E. // Ferroelectrics. 2007. V.354. P.60.

Энергия активации системы «цеолит – металлические наночастицы»

Павлов Сергей Сергеевич

Амурский государственный университет

Астапова Елена Степановна, д.ф.-м.н.

pavlovsergeys@gmail.com

Синтетические цеолиты представляют собой важные в промышленном отношении кристаллы, поскольку, благодаря особенностям их кристаллической структуры, обладают целым набором уникальных ионообменных, сорбционных, каталитических и др. свойств. Однако как объекты физики конденсированного состояния они исследованы крайне слабо.

Цель нашей работы – исследовать электрофизические свойства поликристаллических образцов высококремнеземного цеолита (ВКЦ), механически смешанных с электровзрывными нанопорошками переходных металлов никеля, молибдена, вольфрама в концентрации от 1 до 10 масс. %, а также их оксидами. Цеолит относится к структурному типу ZSM-5, характеризуется ромбической сингонией элементарной ячейки. Эксперимент проводили, измеряя температурную зависимость сопротивления классическим двухэлектродным методом по типу плоскопараллельного конденсатора согласно Госстандарту. Из исследуемых образцов были

приготовлены таблетки толщиной от 1.0 до 1.5 мм, измерения температуры проводили при помощи хромель-алюмелевой термопары в диапазоне от комнатной до 550°C, записывая показания приборов через каждые 10°C. Измерение сопротивления производилось при постоянном напряжении, равном 100 В, нестабильность которого была не более 1% при токе не более 1 мА. Перед началом каждого измерения электроды на образце замыкали не менее 1 мин. Энергию активации вычисляли по формуле (1):

$$E = -\frac{k}{1.6 \cdot 10^{-19}} \cdot \operatorname{tg} \alpha = -0.86 \cdot 10^{-4} \cdot \operatorname{tg} \alpha, [E] = [\text{эВ}], \quad (1)$$

где k – постоянная Больцмана, Дж/К; $\operatorname{tg} \alpha$ – тангенс угла наклона регрессирующей прямой, К, определяемый из графика зависимости $\ln \sigma$ от $1/T$.

Установлено, что логарифмическая зависимость удельной проводимости образцов от $1/T$ имеет изломы (рис. 1), что указывает на механизмы собственной (обменные катионы) и примесной электропроводности, определяющие вид температурной зависимости удельной проводимости.

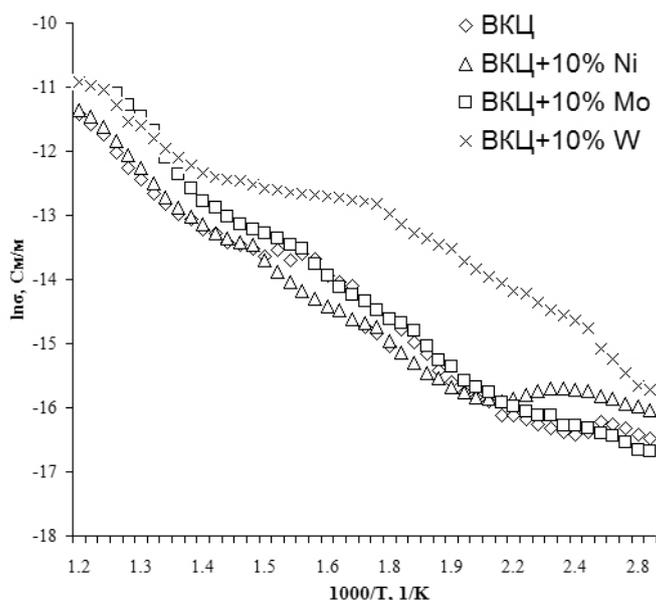


рис.1. Зависимость $\ln \sigma$ от $1/T$

Значения энергии активации приведены в табл. 1, при расчётах рассматривалось два температурных диапазона: от 20 до 350°C, от 350°C до 550°C:

Образец	Высокотемпературный диапазон, E, эВ (>350°C)	Низкотемпературный диапазон, E, эВ (<350°C)
ВКЦ	0.56	0.24
ВКЦ+5% Ni	0.48	0.13
ВКЦ+10% Ni	0.68	0.15
ВКЦ+6.35% NiO	0.50	0.18
ВКЦ+12.71% NiO	0.56	0.23
ВКЦ+5% Mo	0.52	0.31
ВКЦ+10% Mo	0.85	0.16
ВКЦ+15% MoO3	0.55	0.29
ВКЦ+5% W	0.48	0.28
ВКЦ+10% W	0.42	0.16
ВКЦ+6.3% WO3	0.48	0.22
ВКЦ+12.6% WO3	0.36	0.17

При нагревании выше 350°C наблюдается увеличение активационной энергии для всех образцов, что характерно для собственной проводимости цеолита. Как видно, энергии активации большинства модифицированных образцов в области температур 20-350°C ниже энергии активации немодифицированного образца. По-видимому, это объясняется увеличением относительной доли дефектов и примесных атомов в кристаллах в результате механического смешения поликристаллических образцов цеолита с металлическими и оксидными нанопорошками.

Исследование механизмов упруго-пластического деформирования материала при динамическом наноиндентировании

Пирожкова Татьяна Сергеевна

НОЦ «Нанотехнологии и наноматериалы»

Тамбовский государственный университет имени Г.Р. Державина

Тюрин Александр Иванович к.ф.-м.н.

chaxadrachespud@yandex.ru

В связи с широким развитием нанотехнологий, современного материаловедения и наноматериаловедения в последнее время возникает все больший интерес к исследованию процессов деформирования и разрушения материала на микро- и наноуровне, особенно в условиях действия высоких локальных напряжений. Это обусловлено широким развитием и применением нанотехнологий при разработке новых материалов, включая наноструктурированные, конкретных устройств (НЭМС, МЭМС и др.), а также изучении природы размерных и скоростных эффектов при переходе на новый иерархический уровень размеров вплоть до нанометрового [1-6].

Вместе с тем наноконтактная деформация при различных видах взаимодействия чрезвычайно широко распространена в природе и в технике. Она возникает во многих практически важных ситуациях, например, при сухом трении микрошероховатых тел, абразивном и эрозионном износе, в скользящих электрических контактах, при механической и механо-химической шлифовке и полировке, тонком помоле материала в различных мельницах и в других процессах [1-2]. При этом наноконтактное взаимодействие сопровождается упругой и упруго-пластической деформацией и разрушением материала. Происходящая при взаимодействии пластическая деформация представляется результатом громадного числа взаимообусловленных динамических процессов в дефектной структуре материала, и представляет собой сложную функцию отдельных дискретных событий, происходящих в разные отрезки времени с различной скоростью и в различных объемах материала – от атомарных до макроскопических. Ввиду большого числа таких событий в единицу времени и инерционности традиционных средств испытания реальная кинетика пластического течения материала, заложенная природой на микроуровне маскируется, что затрудняет ее обнаружение и исследование микромеханизмов пластической деформации, особенно на начальных стадиях пластичности. Это обуславливает тот факт, что несмотря на впечатляющие достижения современной науки о прочности и пластичности многие важные вопросы определяющие пластическую и упруго-пластическую деформацию на уровне атомных механизмов массопереноса и происходящую в микро- и нанообъемах под действием высоких локальных напряжений остаются до сих пор не выясненными.

Особый интерес при этом вызывают закономерности и механизмы пластической деформации, протекающей на микро- или наноуровне и в тонких приповерхностных слоях, механические свойства которых могут существенно отличаться от аналогичных свойств в макрообъеме [1-6].

При этом до сих пор не известно, какие атомные механизмы массопереноса определяют размеры зоны деформирования и физико-механические характеристики (нано- и микротвердость, модуль Юнга и др.) в субмикроробъемах при действии высоких локальных напряжений. Неизвестно также и какова структура материала в зоне деформирования в этих условиях, каковы микромеханизмы упрочнения, контролирующие сопротивление материала деформированию, а также причина смены упругой деформации – упруго-пластической.

Поэтому целью этой работы являлось исследование условий перехода от чисто упругой к упруго-пластической деформации, и выявление микромеханизмов начальных стадий пластичности, в условиях действия высоких локальных напряжений.

Для исследования поведения материала в этих условиях применялся метод динамического наноиндентирования. Исследования проводились при комнатной температуре на монокристаллах LiF. В качестве калибровочного материала применялся плавный кварц, традиционно используемый для калибровок при наноиндентировании.

Индентирование проводилось треугольным симметричным импульсом нагрузки с варьируемой амплитудой P и длительностью t . Величина P менялась в интервале от 1 мкН до 1 Н. Это позволяло в максимально контролируемых условиях исследовать зону деформирования с характерными размерами от одного нанометра до нескольких микрон (для монокристаллов LiF – от 1 нм до 7 мкм; для плавного кварца – от 0,6 нм до 500 нм). Знание реальной кинетики приложенной нагрузки $P(t)$ и глубины отпечатка $h(t)$ позволяет непрерывно в реальном времени анализировать скорость деформации в функции мгновенного значения контактных напряжений, выделять различные фазы процесса, проводить их анализ, определять энергетические параметры и по этим результатам судить о микромеханизмах вытеснения материала из-под индентора.

Перестроение кинетических зависимостей $P(t)$ и $h(t)$ в характерные $P(h)$ диаграммы (рис. 1, а) позволяет определить переход от чисто упругой к упруго-пластической деформации и определять энергетические характеристики процесса формирования отпечатка (подведенную энергию, возвращенную энергию, энергию поглощенную при формировании отпечатка, приведенную энергию и др.).

Анализ проведенных исследований показал, что на монокристаллах LiF, при скорости относительной деформации порядка единиц обратных секунд, чисто упругая деформация материала происходит вплоть до нагрузок равных 12 - 14 мкН и глубин отпечатка 2-3 нм, а для плавленого кварца – 50-70 мкН и 10-15 нм – ответственно.

При увеличении нагрузки чисто упругая деформации сменяется упруго-пластической. Это позволяет вычислять перечисленные выше энергетические характеристики. Полученные значения ряда энергетических характеристик приведены на рис. 1 (б). Из рисунка видно, что для LiF практически вся подведенная энергия рассеивается на формирование отпечатка. Расчет удельной энергии, приходящейся в среднем на один атом материала вытесненного индентором при формировании отпечатка, показывает, что эта величина зависит от величины приложенной нагрузки и глубины отпечатка. При этом, для LiF в диапазоне глубин от 7 мкм до 400 - 500 нм эта величина остается практически постоянной принимая значения 0,05 - 0,08 эВ/атом, а с уменьшением глубины растет вплоть до глубины характерной для чисто пластического отпечатка, принимая при глубине 4 нм значения равные 3 эВ/атом.

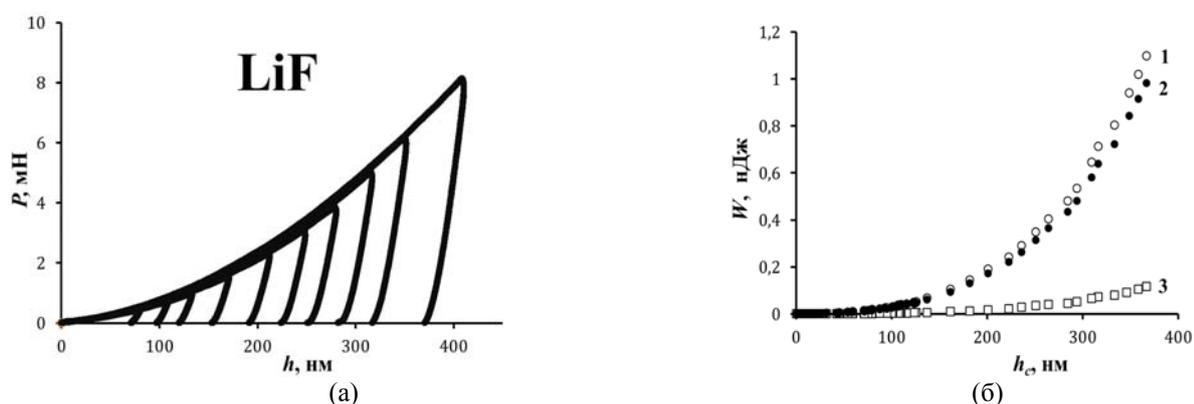


рис.1. Характерные $P(h)$ диаграммы (а) и зависимость энергетических характеристик от глубины пластического отпечатка (б) при наноиндентировании монокристаллов LiF. 1 – подведенная энергия; 2 – энергия, затрачиваемая на формирование отпечатка; 3 – возвращенная энергия.

Полученные значения приведенной энергии (0,05 – 0,08 эВ/атом – в диапазоне глубин от 7 мкм до 400 – 500 нм, и 3 эВ/атом – для глубины 4 нм) характерны соответственно для дислокационных и моноатомных микромеханизмов пластической деформации в монокристаллах LiF. Между этими крайними значениями лежат значения характерные для краудсионных механизмов пластичности, которые значительно больше дислокационных, но меньше моноатомных. Это означает, что деформация материала при индентировании монокристаллов LiF, идет вначале чисто упруго (до глубин порядка 2 – 3 нм), а затем сменяется упруго-пластической. При этом пластическая деформация начинается моноатомными микромеханизмами, которые сменяются краудсионными, а затем дислокационными.

Таким образом, в работе, на примере монокристаллов LiF и плавленого кварца, исследована реальная кинетика пластической деформации в наномасштабе. Определены участки чисто упругой и упруго-пластической деформации. Выявлены критерии перехода (критические значения нагрузки и глубины) от упругой деформации к упруго-пластической. Определены энергетические характеристики процесса формирования отпечатка и установлена номенклатура структурных дефектов, ответственных за массоперенос на всех стадиях формирования отпечатка от единиц нм до единиц микрон.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы, программы «У.М.Н.И.К.» и фонда РФФИ.

Список публикаций:

- [1] Головин Ю.И. Наноиндентирование и его возможности. М. Машиностроение, 2009, 312с.
- [2] Springer Handbook of Nanotechnology (Ed. B. Bhushan). Springer. New York. 2008. 1916 p.
- [3] Oliver W.C., Pharr G.M. // J. Mater. Res. 1992. V. 7. № 6. P. 1564-1583.
- [4] Головин Ю.И., Тюрин А.И., Иволгин В.И., Коренков В.В. // ЖТФ. 2000. Т 70. №5. С. 82-91.
- [5] Golovin Yu.I., Tyurin A.I., Farber B.Ya. // Phil. Mag. A. 2002. V. 82. № 10. P. 1857-1864.
- [6] Головин Ю.И., Дуб С.Н., Иволгин В.И., Коренков В.В., Тюрин А.И. // ФТТ. 2005. Т 47. В. 6. С. 961-973.

Емкость нанокompозитных систем активированный уголь - металл

Писарева Татьяна Александровна

Удмуртский государственный университет

Харанжевский Евгений Викторович, к.т.н.

Tanucha5@yandex.ru

Электрохимические конденсаторы (ионисторы, суперконденсаторы) – устройства питания, основанные на двойном электрическом слое, возникающем на границе металл – электролит. Как известно, ёмкость конденсатора прямо пропорциональна площади обкладок и обратно пропорциональна расстоянию между ними. Благодаря тому, что электроды ионистора изготавливают из материалов с развитой удельной поверхностью, а двойной электрический слой электролита, проявляющий диэлектрические свойства, имеет размеры атомарного масштаба, емкость ионисторов на несколько порядков превосходит любые другие типы конденсаторов. Материалы на основе графита являются перспективными для изготовления электродов ионисторов. Область применения таких источников питания широкая, т. к. электрохимические конденсаторы обладают большой емкостью, большим сроком службы и т.д. Главным недостатком электрохимических конденсаторов является высокое внутреннее сопротивление активного вещества. Как известно из литературных данных емкость электрохимических конденсаторов (ЭК) зависит от сопротивления используемого электролита, но экспериментально нами была доказана зависимость и от внутреннего сопротивления материала электродов. Поэтому целью данной работы является исследование зависимости емкости нанокompозитных систем активированный уголь – металл от внутреннего сопротивления материала электродов. Для этого проведены теоретические расчеты электрической цепи с учетом сопротивления активного материала электродов, представленной на рис. 1 в сравнении с экспериментальными данными.

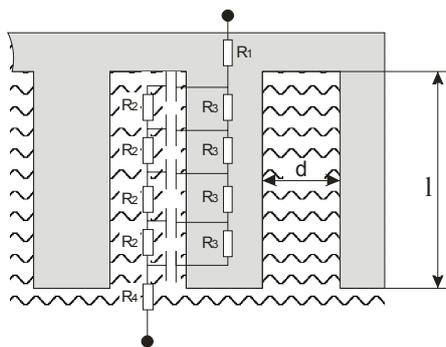


рис.1. Схема электрической цепи, реализуемой в реальном электрохимическом конденсаторе.

Исходными материалами для получения электродов электрохимических конденсаторов, являются порошок алюминия марки «ХЧ», активированный уголь, карбонильное железо марки Р20 и шестиводный карбонат никеля $\text{NiCO}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ марки «ХЧ». Подготовленные порошковые материалы подвергались механическому измельчению в необходимом количестве для создания нанокompозита. После измельчения образовавшийся порошкообразный композит системы С – Ni подвергался отжигу в среде водорода при температурах 600, 700, 900 °С. Средняя толщина полученных электродов составила 450 мкм.

Результирующая емкость электрохимических конденсаторов измерялась методом снятия циклической вольтамперной характеристики при различных скоростях развертки потенциала с использованием потенциостата [2]. Для обеспечения одинаковой емкости двойного электрического слоя использовали идентичные рабочий электрод и противозлектрод с видимой площадью 1 см². Это позволило не использовать электрод сравнения при снятии циклических вольтамперных характеристик. Для приближения к условиям, в которых работают ЭК, была изготовлена специальная электрохимическая ячейка с небольшой рабочей областью так, чтобы уменьшить сопротивление электролита. В работе использовался органический электролит 1М раствор TEABF_4 (тетрафтороборат тетраэтиламмония) в ацетонитриле, т.к. его преимущество в сравнении с электролитами на водной основе является более высокое доступное напряжение.

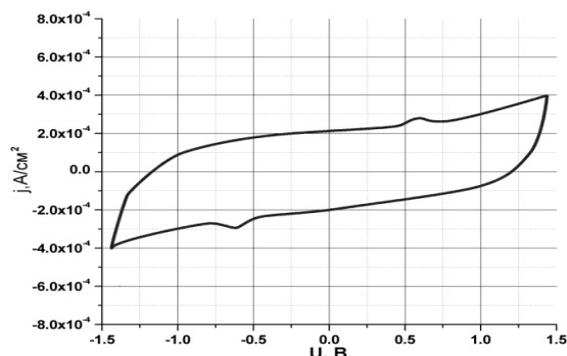


рис.2. Вольтамперная характеристика образца Al – 47% C при скорости развертки потенциала 20 мВ/с.

Типичный вид вольтамперной характеристики ЭК электродов изготовленных на основе композитного материала Al-C, показан на рис. 2. Форма кривой отличается от прямоугольной формы идеального ЭК [3]. Пики на кривых при потенциалах -0,7 и 0,7 В соответствуют окислительно-восстановительным процессам и демонстрируют вклад поверхностных функциональных групп. Электроемкость ЭК рассчитывалась согласно формуле

$$C = \frac{I}{dU/dt}, \quad (1)$$

где I – сила тока в цепи противозэлектрода. Отсюда для состава материала электродов Al – 47% C – SiO₂ максимальному току в цепи соответствует электроемкость 20 мФ/см². С учетом поверхностной плотности $\sigma = 0,77$ мг/см² композита каждого из электродов ЭК, результирующее значение удельной электроемкости ионистора, изготовленного из полученного материала составляет $C=13$ Ф/г.

Список публикаций:

- [1] Kotz R., Carlen M. Principles and applications of electrochemical capacitors // *Electrochimica Acta* 45. 2000. С. 2483–2498.
- [2] Е.В. Харанжевский, Т.А. Писарева. Дисперсность материалов электрохимических конденсаторов, полученных механоактивацией и лазерным спеканием систем Al-C // *Коллоидный журнал*. № 3. 2012. В печати.
- [3] LinkHolze Rudolf. *Experimental electrochemistry: a laboratory textbook*. LinkWiley. 2008. XVIII 242 p.

Мёссбауэровское исследование магнитной структуры плёнок Fe/Pd/MgO

Плетнев Олег Николаевич

Осетров Евгений Игоревич

Сибирский федеральный университет

Баюков Олег Артемьевич, д.ф.-м.н.

print423@gmail.com

Работа посвящена исследованию процессов образования упорядоченных структур при твердофазном синтезе тонких пленок и выяснению вопроса о соотношении между химическим упорядочением и магнитными свойствами при формировании одноосной анизотропии.

Мёссбауэровские измерения проведены при комнатной температуре на спектрометре МС1104Ем с источником Co57(Cr). В общем случае спектры представляют собой сумму нескольких секстетов с различными химическими и квадрупольными сдвигами (рис.1а).

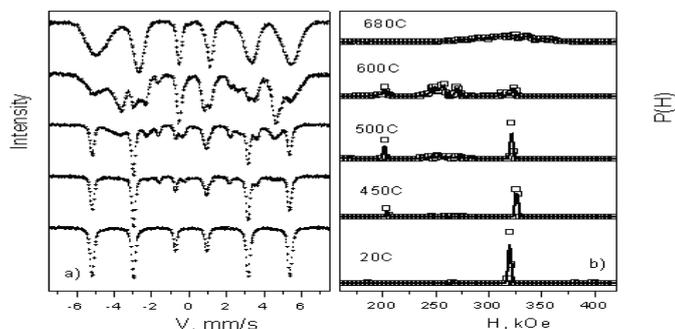


рис.1. Мёссбауэровские спектры пленок PdFe/MgO после различных температур отжига – а) и распределение вероятности сверхтонких полей – б) в экспериментальных спектрах.

На первом этапе расшифровки спектров построены вероятности $P(H)$ сверхтонких магнитных полей на ядрах железа (*рис. 1b*). Как видно на *рис. 1b*, в исходном образце обнаруживается одна фаза с параметрами, близкими к параметрам α -Fe. При отжиге в пленке появляются две дополнительные фазы с полями ~ 200 и ~ 260 кЭ. Вероятность дополнительных фаз возрастает при увеличении температуры отжига 600С. После отжига при 680С на распределении $P(H)$ наблюдается один широкий максимум около 320 кЭ, свидетельствующий о сильном магнитном разупорядочении в пленке.

На втором этапе расшифровки спектров информация, полученная из распределений $P(H)$, использована для построения модельных спектров, которые затем подгонялись к экспериментальным спектрам при варьировании всего набора параметров сверхтонкой структуры.

В исходной пленке (20С) реализуется однофазное состояние. Мессбауэровские параметры близки к параметрам α -Fe, но $H = 320$ кЭ меньше, чем 330 кЭ в стехиометричном α -Fe, вероятно за счет неоднородности (блочности), обусловленной несовершенством технологии (отклонение от монокристалличности). Видимо и $\theta = 66^\circ$, меньше 90° , также обусловлен этим эффектом. Кроме этого накладывается эффект тепловых флуктуаций магнитного момента. В основном момент лежит в плоскости пленки.

После отжига при 450С в пленке обнаруживаются три фазы. Первая фаза соответствует α -Fe. Мессбауэровские параметры этой фазы приблизились к параметрам стехиометричного α -Fe, т.е. отжиг содействует монокристалличности данного слоя пленки. Проекция момента этой фазы на плоскость пленки увеличилась. Вторая фаза, составляющая $\sim 10\%$, с характерными параметрами $IS = 0.22$ мм/с и $H = 259$ кЭ, вероятно, представляет зарождающуюся тетрагональную фазу $L1_0$, эти параметры близки к параметрам этой фазы для массивных сплавов [1,2]. Относительно малое наблюдаемое квадрупольное расщепление $QS = 0.17$ мм/с обусловлено влиянием соседних слоев на структуру этой фазы. Уширение линий поглощения этой фазы обусловлено только флуктуациями электронной плотности и искажений решетки. Большая проекция среднего магнитного момента на направление гамма-излучения свидетельствует о том, что момент перпендикулярен плоскости пленки. Третья фаза, составляющая $\sim 17\%$, с характерными параметрами $IS \sim 0.19$ мм/с, $H \sim 200$ кЭ и $QS \sim 0.03$ мм/с, возможно, представляет сплав $FePd_3$, т.е. область с малой концентрацией железа, где малое число магнитных соседей обуславливает малую наблюдаемую величину H при комнатной температуре. Малое QS свидетельствует о высокой локальной симметрии вокруг атома железа. Средний магнитный момент третьей фазы не имеет предпочтительного направления относительно плоскости пленки. Обнаруживаемые структурные фазы подтверждаются рентгеновскими измерениями, выполненными Г.Н.Бондаренко (ИХХТ СО РАН).

После отжига при 500С заселенности фаз $L1_0$ и $FePd_3$ возрастают. Увеличивается QS фазы $L1_0$, свидетельствующая о возрастании тетрагональных искажений. Дискретность и узость диапазонов мессбауэровских параметров этих трех фаз говорят о термодинамической предпочтительности образования именно этих фаз.

После отжига при температуре 600С, наблюдаемые три фазы приобретают равные заселенности, по $\sim 30\%$. Фаза α -Fe разбавляется палладием, приобретая параметры $IS \sim 0.16$ мм/с и $QS \sim -0.1$ мм/с. Магнитная неоднородность, связанная, по-видимому, с концентрационной неоднородностью в слое, приводит к уширению внешних линий секстета. Средний магнитный момент этого слоя параллелен направлению гамма-излучения, т.е. направлен перпендикулярно плоскости пленки. Фаза $L1_0$ приобретает максимальное локальное искажение $QS \sim 0.68$ мм/с, связанное с тетрагональным искажением решетки этой фазы. Средний угол между направлением магнитного момента фазы и направлением гамма-лучей, $\theta \sim 42^\circ$ не равен нулю, вероятно, из-за магнитного расслоения фазы $L1_0$. На *рис. 1b* в распределении $P(H)$ при 600С в области полей около 260 кЭ обнаруживаются три максимума, которые свидетельствуют о возможных трех магнитных состояниях или неэквивалентных позициях, принадлежащих фазе $L1_0$. Усредненный момент неэквивалентных позиций может быть направлен перпендикулярно плоскости пленки. Средний момент фазы $FePd_3$ также имеет предпочтительное направление перпендикулярно плоскости пленки. Возможно, магнитная структура фазы $L1_0$ имеет зонтичный характер. Эффективное взаимодействие с ней выстраивает магнитные моменты фаз Fe_3Pd и $FePd_3$ перпендикулярно плоскости пленки.

После отжига при 680С наблюдается (*рис. 1b*) широкое распределение сверхтонких полей от 250 до 370 кЭ, т.е. в магнитном отношении пленка стала полностью разупорядочена. Аппроксимация спектра одним секстетом приводит к параметрам, характерным для фазы Fe_3Pd .

Список публикаций:

- [1] D. Halley, P. Auric, P. Bayle-Guillemaud, B. Gilles, A. Marty and D. Jalabert J. Appl. Phys. 91, N12, 9757-9763 (2002).
[2] S.L. Zhang, J.R. Zhang, Phys. Stat. Sol. B, 182, 421-427 (1994)

Статистические и энтропийные характеристики квазикристаллического упорядочения

Полянский Дмитрий Александрович

Дальневосточный федеральный университет

rambo192@mail.ru

Классическая кристаллография базируется на трансляциях Бравэ, которые являются весьма жёсткими ограничениями. Наложение трансляций Бравэ на группу SO_3 урезает бесконечномерный вектор характеров данной группы до пятимерного. Именно отсюда следует запрет на существование оси пятого порядка L_5 и осей порядка больше шести ($L_{n>6}$), что не позволяет с помощью аппарата кристаллографии описывать квазикристаллические симметрии.

Для того, чтобы построить содержательное обобщение кристаллографии, мы решили ограничиться минимальным классом квазикристаллических симметрий, порядок которых не превышает максимальную кристаллографическую симметрию (L_6). К ним относятся квартетная Q-мозаика и пентасимметричная мозаика Пенроуза. Исследуемые мозаики имеют алфавит $[2q \times 2p]$, то есть состоят из двух типов элементов - $2q$ (ромб и квадрат для Q-мозаики, два ромба для мозаики Пенроуза), между которыми возможно два типа контактов - $2p$ (рёберный и точечный). В этом состоит первое топологическое отличие данных квазикристаллических паркетов от классических решёток, которые имеют только один пространственный элемент, с помощью которого и идёт замощение пространства паркетом соответствующей симметрии

Первая координационная сфера для классических решёток это постоянное число, кратное симметрии затравочного элемента, наследуемой морфогенетически синтезируемым паркетом. На мозаике Пенроуза она насчитывает 10 ромбов для любого стартового элемента, что очевидно является отражением пентасимметрии. В случае Q-мозаики ситуация сложнее, число элементов первой координационной сферы колеблется от 8 до 11.

Различные паркеты можно представить не только как совокупность ячеек сетки, но и как систему вершинных координат. На кристаллографических паркетах присутствует только один тип вершинной координации с характерной ветвистостью, коррелирующей с симметрией паркета, т.е. в топологическом плане классическим паркетам свойственна строгая детерминированность. Для квазикристаллических паркетов наблюдается спектр вершинных координат. Для Q-паркета порядок вершинных координат колеблется от 3 до 8, для паркета Пенроуза – от 3 до 7. Исходя из теории перечисления вершинных координат была сделана попытка установить функцию их распределения, статистику. Для Q-паркета распределение вершинных координат оказалось экспоненциальным, с медианой, приходящейся на координацию с порядком $g=4$. Для паркета Пенроуза координационная статистика весьма нетривиальна, содержит глобальную моду на координации $g=5$ при общем ниспадающем характере. Усреднённая тенденция подчиняется гиперболической статистике Ципфа – Парето – Мандельброта (ЦПМ) с показателем $\gamma \sim 1.5$.

Для дальнейшего исследования от каждого паркета было построено адекватное древесно-графовое отображение в квазистохастические древесные графы Кейли (ДК). Ячейки мозаики отображаются вершинами графа, отношения смежности – рёбрами графа. Построение дерева идёт следующим образом: за центр принимается одна из ячеек, вокруг строится первая координационная сфера из всех контактирующих с ней ячеек. Вторая сфера строится из всех ячеек, контактирующих с ячейками первой и т.д. [1]. На полученных деревьях строятся перечисляющие полиномы, которые переводятся в вероятностную форму, по ним определяются информодинамические (в частности энтропийные) характеристики, и изучается их перколяция по уровням ДК [2]. За основную характеристику принимается энтропия Вайда (H_v). Определяя коэффициент структурированности η , можно судить о степени разупорядочения структуры. Так как исследуемые паркеты состоят из двух элементов, для каждого было построено по два с различными стартовыми элементами, чтобы выяснить, влияет ли выбор стартового элемента на величину соответствующих информодинамических функционалов и характер их перколяции по уровням ДК.

Для обоих исследуемых паркетов место определённый, причём весьма значительный, средний энтропийный инвариант, вокруг которого происходят квазипериодические флуктуации значения энтропийного функционала. Для мозаики Пенроуза для обоих ДК значение энтропийного инварианта получился одинаковым, $H_v=0.8$. В случае Q-мозаики для дерева, стартующего от квадрата, первая координационная сфера которого содержит 8 элементов (кратное симметрии паркета), $H_v=0.8$. Для дерева, стартующего от ромба (10 элементов в КС), $H_v=0.83$.

Для более точного учёта структуры алфавита $[2q \times 2p]$ была применена симплициальная протодекомпозиция. В качестве ее элемента декомпозиции выбирается модуль алфавита с учётом соответствующего контакта и типа вершины, т.е. разложение ДК на ветви. Под ветвью понимается тип вершины с исходящим из неё типом координации. С случае мозаики Пенроуза и Q-мозаики разложение велось на четыре элементарные ветви. На обоих ДК для Q-мозаики распределение данных элементов оказалось

экспоненциальным, на ДК для мозаики Пенроуза – гиперболическим, т.е. для каждой из минимальных квазикристаллических симметрий наблюдается свой класс распределения.

В результате проделанной работы удалось выделить характерные топологические и энтропийные признаки минимального класса квазикристаллических структур, принципиально отличающиеся от аналогичных характеристик классических решеток, а также обнаружить внутриклассовые различия.

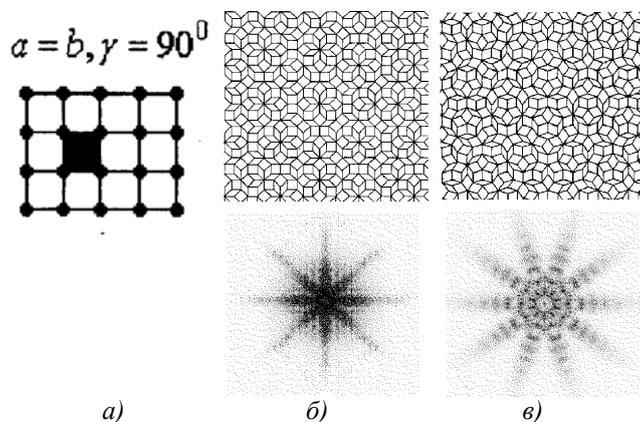


рис.1. а – квартетный паркет, б – Q-паркет, в – паркет Пенроуз

Список публикаций

- [1] Юдин В.В. и др. // Кристаллография. 2002. Т. 47. № 2. С. 224.
 [2] Юдин В.В. и др. // Изв. РАН. Сер. физическая. 2001. № 10. С. 1405.

Особенности структуры и свойств плазменно-детонационных покрытий на основе Ni-Cr и Co-Cr

Прохоренкова Надежда Валерьевна

Алонцева Дарья Львовна

Восточно-казахстанский технический государственный университет им. Д.Серикбаева
nadin_kaz@mail.ru

Работа посвящена исследованию структурно-фазового состояния и механических свойств порошковых покрытий на основе Ni и Co, нанесенных методом плазменной детонации на стальные подложки и модифицированных облучением.

Как известно, поверхность определяет многие свойства твердых тел – от декоративных до прочностных. Велико значение структуры и свойств поверхности и приповерхностных слоев твердых тел для техники. Так, например, электрические свойства полупроводников зависят от состава и структуры поверхностного слоя толщиной до 1мкм, а у металлов и сплавов морфология, фазовый состав и дислокационная структура поверхностных слоев определяют износостойкость и коррозионную стойкость, предел выносливости и жаростойкость, сопротивление солевой коррозии и пылевой эрозии металлов и сплавов. Поэтому понятно, что технологические процессы, позволяющие регулировать или перестраивать поверхностные слои, имеют большое будущее. Вместе с тем необходимо постоянное исследование новых материалов и новых явлений, протекающих при поверхностной обработке пучками заряженных частиц.

Создание новых машин и агрегатов для работы на сверхвысоких скоростях, при высоких температурах и давлениях ужесточают требования к конструкционным материалам. Одним из наиболее современных методов получения таких материалов являются комбинированные (дуплексные, триплексные) методы обработки сплавов [1, 2, 3].

В работе рассмотрены материалы порошковых покрытий (ПГ-19Н-01, ПГ-10Н-01 и АН-35), их достоинства и недостатки. Проанализировано влияние облучения на фазовую стабильность, а также даны общие характеристики диаграмм состояния металлических систем Fe-Cr, Fe-Ni, Ni-Cr, Fe-Ni-Cr, Fe – Co, исследована морфология поверхности плазменно-детонационных покрытий на основе Ni и Co, а так же получены результаты механических свойств и структурно-фазового состава покрытий и их подложек. Размеры структурных составляющих покрытий и подложки сопоставлены с данными анализа микротвердости по глубине покрытия. Был проведен топографический анализ серии образцов покрытий после их нанесения методом плазменной детонации.

На основе данных РСФА, ПЭМ, металлографии и сканирующей электронной микроскопии предложена схема строения покрытий, нанесенных методом плазменной детонации.

Обнаружено формирование нанокристаллической γ -фазы на основе Ni (размеры нанозерен 2-3 нм) и выделения упрочняющей фазы Ni₃Cr с пластинчатой морфологией в материале покрытия ПГ-19Н-01, нанесенного методом плазменной детонации. Определены типы и параметры ее решетки, объемная доля фазы в покрытии.

Для исследуемых покрытий, модифицированных облучением, является увеличение объемной доли упрочняющих дисперсных интерметаллидных фаз, гомогенизация микроструктуры покрытия (формирование мелкозернистой однородной микроструктуры, увеличение объемной доли твердого раствора), уменьшение шероховатости поверхности за счет оплавления электронным пучком или плазменной струей. Выявлены общие закономерности структурно-фазовых превращений в модифицированных покрытиях: увеличение объемной доли упрочняющих дисперсных интерметаллидных фаз, гомогенизация микроструктуры покрытия (формирование мелкозернистой однородной микроструктуры, увеличение объемной доли твердого раствора). Обнаружено увеличение переходного от покрытия к подложке упрочненного слоя до толщины порядка 150 мкм в модифицированных облучением покрытиях (увеличение диффузной зоны).

Проведенные исследования включали характеристику изменений микроструктуры и свойств аустенитных порошковых покрытий после электронного и плазменного облучения, а также выявление структурно-силовых особенностей упрочнения облученных покрытий.

В результате проведенных комплексных материаловедческих исследований получены новые результаты, существенно расширяющие представление о закономерностях формирования микро- и наноструктур при нанесении порошковых покрытий методом плазменной детонации. Полученные результаты носят общий характер и могут быть применены к широкому классу порошковых защитных покрытий

Список публикаций:

[1]Кадыржанов К.К., Комаров Ф.Ф., Погребняк А.Д., Русаков В.С., Туркебаев Т.Э. Ионно-лучевая и ионно-плазменная модификация материалов. – М.: МГУ – 2005. С. 640

[2]Тюрин Ю.Н., Погребняк А.Д. Влияние дуплексной обработки на свойства поверхности изделий, Трение и износ. №2, (2002), С. 207-214

[3]Pogrebnyak A.D., Shumakova N.I. Effect of "duplex" treatment on changes of Physical and Mechanical properties of steel (0,3 wt.%C), Surf. and Coat. Tech. V.122, (1999), P.183-187

Рентгеноструктурный анализ $C_{12}H_{22}O_{11} - NaCl - 2H_2O$

Рыбина Эльвира Нафизовна

Челябинский государственный педагогический университет

Брызгалов Александр Николаевич, д.ф.-м.н.

elvirarybina@mail.ru

Очень плодотворным методом изучения геометрического строения молекулы (взаимного расположения центров атомов и углов между связями) является метод рентгеноструктурного анализа кристаллов органических веществ. Он основан на том, что всякое вещество обладает способностью рассеивать падающее на него излучение, в том числе рентгеновское. При этом рассеяние рентгеновских лучей кристаллами находится в определенном соответствии с расположением атомов в кристалле.

Сахароза и поваренная соль в отдельности изучены в достаточном объеме и не представляют практического интереса. Однако нет достаточных экспериментальных данных о соединениях этих веществ в кристалле.

В работе исследовались кристаллы, выращенные из водного раствора методом испарения. Продолжительность выращивания составила полгода. Методом рентгеновского структурного анализа на дифрактометре ДРОН-3.0 с фокусировкой по схеме Брегга – Брентано были проведены исследования структуры исходных материалов свекловичного сахара, хлорида натрия и выращенных кристаллов. Проверку и уточнение данных проводили по методу внешнего стандарта, в качестве которого был выбран корунд Al₂O₃. Съемка исследуемых образцов проводилась в интервале углов $10^\circ < 2\theta < 60^\circ$ с использованием CuK α -излучения. Напряжение на трубке составляло 30 кВ, анодный ток 10 мА. Регистрацию рассеянного излучения проводили сцинтилляционным счетчиком по точкам с интервалом $2\theta = 1^\circ$ в режиме автоматической записи. Для обработки данных была использована программа, позволяющая рассчитывать углы, соответствующие дифракционным максимумам по точке центра тяжести рефлекса, межплоскостные расстояния, интенсивности

дифракционных максимумов и интегральные интенсивности рефлексов. Нами были сняты образцы кристаллов сахара (рис.1) и хлорида натрия (рис.2), затем образцы выращенного кристалла (рис.3).

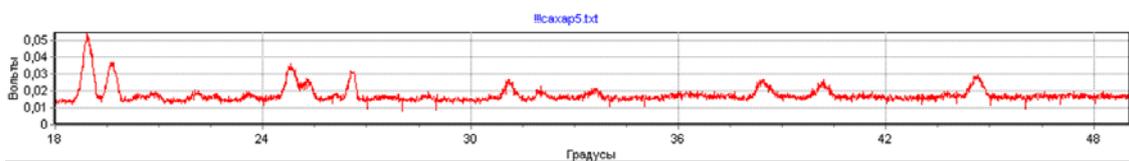


рис.1. Спектр свежловичного сахара песка

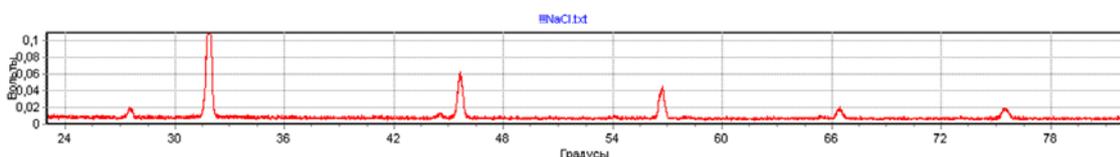


рис.2. Спектр NaCl

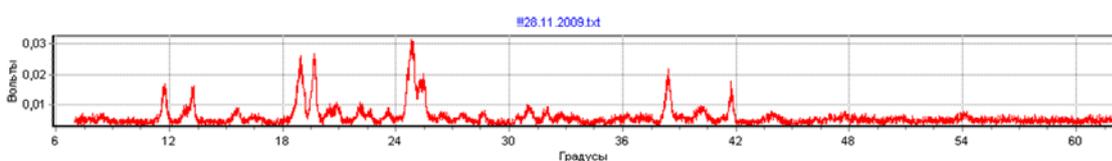


рис.3. Спектр $C_{12}H_{22}O_{11} - NaCl - 2H_2O$

Анализ современных баз структурных и дифракционных данных подтвердил результаты спектров представленных на рис.1 и рис.2. Кристаллы сахара и поваренной соли имеют кубическую кристаллическую решётку. Спектр выращенных кристаллов (рис.3) представляет структуру твёрдого раствора в котором ионы натрия и хлора вошли в решётку кристалла, так как отдельно соль не выделилась. Как можно видеть из рисунка, характеристические пики хлорида натрия в спектре выращенного кристалла отсутствуют, что свидетельствует тому, что поваренная соль отдельно не выделилась, а вошла в кристаллическую решётку в виде ионов натрия и хлора.

Применение методов атомно-силовой микроскопии для наблюдения поверхности тонкой пленки магнитной жидкости

Сабиров Артур Айсхатович

Пермский государственный национальный исследовательский университет

Лунегов Игорь Владимирович, к.ф.-м.н.

baron@xakep.ru

Поверхностные явления, наблюдаемые на тонких пленках магнитных жидкостей, привлекают интерес исследователей в силу недостаточной изученности. Развитие атомно-силовой микроскопии (АСМ) открывает большие возможности для проведения подобного рода исследований, требующих высокой степени точности и исключения воздействия на поверхность образца.

В экспериментах в качестве исследуемых образцов выступала тонкая пленка магнитной жидкости на поверхности покровного стекла. На поверхность покровного стекла помещалась капля магнитной жидкости, после чего образец длительное время подвергался воздействию «нормального» магнитного поля. Керосин, являющийся основой магнитной жидкости, выветривался, в результате чего на поверхности стекла образовывалась тонкая пленка.

При проведении исследований применялся атомно-силовой микроскоп «Ntegra» (NT-MDT). Измерения проводились в полуконтактном режиме кантилевером NSG01. Резонансная частота ($f_{рез}$) 136,739 кГц. Наблюдения проводились при температуре окружающей среды 295,1 К и относительной влажности воздуха 34,2%.

В ходе проведения серии наблюдений были обнаружены капельные агрегаты ферромагнитных частиц с характерной протяженностью $l \sim 260-340$ нм, $w \sim 150-170$ нм. Капельный агрегат состоит из ферромагнитных

частиц с характерным диаметром 20 нм. На *рис.1* представлен скан образца с капельным агрегатом. Причины формирования агрегов различной конфигурации описываются в [1].

Обнаружение отдельных ферромагнитных частиц и капельных агрегатов свидетельствует о том, что метод атомно-силовой микроскопии может быть использован при исследовании свойств магнитных жидкостей.

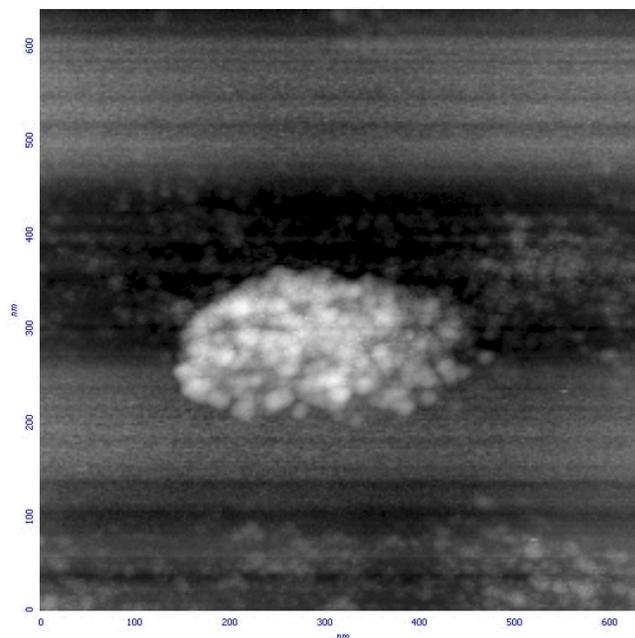


рис.1. Капельный агрегат.

Протяженность по горизонтали $l = 318$ нм, протяженность по вертикали $w = 172$ нм

Список публикаций:

[1] Лахтина Е. В., Пиеничников А. Ф. // Коллоидный журнал. 2010. Т. 72. № 2. С. 231-237.

Влияние твердофазных реакций на свойства тонкопленочных структур Fe/Pd

Семячков Виктор Анатольевич

Жигалов Виктор Степанович, Мяжков Виктор Григорьевич

Сибирский государственный аэрокосмический университет

Жигалов Виктор Степанович, д.ф.-м.н.

viktorsa@inbox.ru

Поиск новых материалов с необходимыми для современной наноэлектроники свойствами на сегодняшний день является актуальной задачей. Структурные и магнитные свойства Fe/Pd тонких пленок, упорядоченных по типу $L1_0$, исследуются в связи с их потенциальной возможностью для высокоплотной магнитной записи информации и создания специальных магнито жестких сред [1]. Упорядоченная $L1_2$ -фаза (FePd₃) в настоящее время изучена недостаточно и поэтому ее исследование представляет научный и практический интерес [2].

В представленном исследовании образцы были изготовлены с использованием твердофазных реакций (твердофазный синтез). В качестве исходных образцов получены две серии пленок Fe/Pd на подложках из монокристаллического MgO(001) с атомным соотношением железа и палладия 1/1 и 1/3. Двухслойные структуры изготавливались методом электронной бомбардировки тигельных испарителей с кольцевым катодом в вакууме 10^{-6} торр. В дальнейшем, пленки подвергались термическому отжигу в диапазоне от 300 до 800 °C и выдержкой при каждой температуре в течение 30 мин. За счет химического межслойного взаимодействия формировались различные фазы. После каждой ступени отжига и охлаждения до комнатной температуры в образцах измерялись первая константа магнитной анизотропии и намагниченность насыщения методом крутящих моментов с максимальным магнитным полем 18 кЭ, а также исследовались структурные и фазовые превращения, а также коэрцитивная сила. Зависимость $R(T)$ снималась «in situ».

В пленках, при отжиге вплоть до 400 °C, практически отсутствуют изменения магнитных свойств по отношению к исходным образцам. Отжики при $T > 400$ °C приводят к увеличению константы

кристаллографической анизотропии в пленках с атомным соотношением 1/1 примерно на порядок и к исчезновению таковой в пленках с соотношением 1/3. Такая модификация анизотропных свойств приводит к различным значениям коэрцитивности (H_C). Как показали дополнительные исследования магнитостатических свойств, коэрцитивная сила в синтезированных фазах в первом случае выросла и составляет ~ 1 кЭ, в другом случае пленки становятся магнитомягкими и H_C становится менее 10 Э (рис. 1).

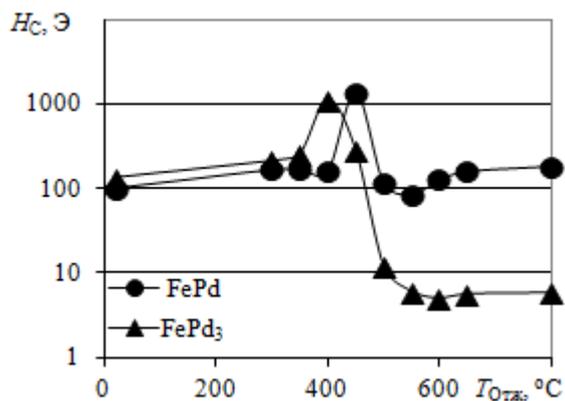


рис. 1. Зависимость коэрцитивной силы от температуры отжига для образцов FePd и FePd₃

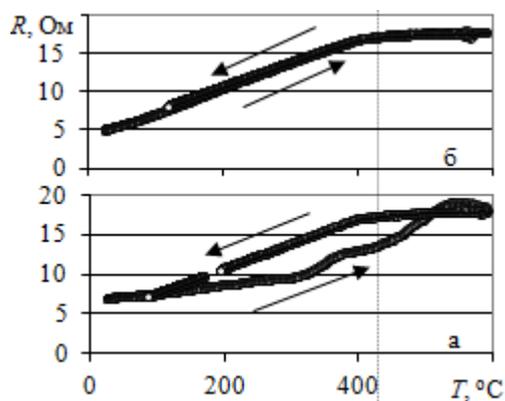
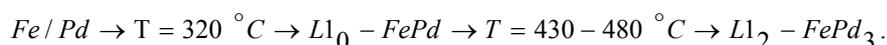


рис. 2. Зависимость электросопротивления от температуры отжига образца FePd: а- первичное нагревание, б- повторное нагревание

В работе также были получены зависимости электросопротивления от температуры отжига для образцов Fe/Pd и Fe/Pd₃. На графиках показаны зависимости электросопротивления от температуры отжига при первичном (рис. 2а) и повторном (рис. 2б) нагревании для пленки Fe/Pd. В первом случае видно, что увеличение температуры отжига до 320 °С приводит к увеличению электросопротивления только за счет увеличения фоновых колебаний решетки образца, твердофазные реакции на данном участке не происходят. Температура 320 °С является началом инициирования образования первой фазы - L1₀, формирование которой заканчивается при 360 °С. Дальнейшее увеличение температуры отжига приводит к формированию L1₂-фазы. Охлаждение и повторный нагрев сопровождается особенностью при T=430 °С. Предполагается, что данное изменение электросопротивления объясняется переходом образца из ферромагнитного в парамагнитное состояние. Зависимости $R(T)$ для пленки Fe/Pd с атомным соотношением 1/3 имеют аналогичный вид.

Эти данные были подтверждены результатами, полученными при измерении намагниченности насыщения и первой константы магнитной анизотропии, а также рентгеновской спектроскопии. Таким образом, удалось установить, что при твердофазных реакциях в зависимости от величины температуры отжига формируются различные фазы. В свою очередь, фазовый состав пленок влияет как на магнитные свойства, так и на электрические свойства исследуемых пленок. В работе установлены температуры инициирования твердофазных реакций каждой фазы и их последовательность. Данная последовательность выглядит следующим образом:



Полученные результаты позволяют рекомендовать использование твердофазных межслойных химических взаимодействий для синтеза пленочных образцов с меньшими энергетическими и экономическими затратами. Изменение концентрационного состава тонких пленок Fe/Pd также позволяет получать как магнитожесткие, так и магнитомягкие материалы.

Список публикаций:

[1] Мягков В. Г. Твердофазный синтез эпитаксиальных L10-FePd(001) тонких пленок: структурные превращения и магнитная анизотропия // Письма в ЖЭТФ, 2010, Т.91, В. 9, С. 399-403.

[2] Жигалов В. С. Методы получения магнитных слоев и исследования их физических свойств: учеб. пос. // СибГАУ-Красноярск, 2008, 164 с.

Теоретическое исследование магнитных свойств вакансий в гексагональном нитриде бора

Сержантова Мария Викторовна

Сибирский федеральный университет

Кузубов Александр Александрович, к.ф.-м.н.

sunrise.86@mail.ru

Появление магнитного момента в монослое h-BN, обусловлено наличием вакансий. В работе [1] проведено теоретическое исследование в рамках теории функционала плотности шести видов дефектов в структуре монослоя h-BN: вакансии бора (V_B) и азота (V_N), замещение бора атомом (B_N) азота и наоборот (N_B), а также замещение атома бора или азота атомом углерода (C_B , C_N). Спонтанной намагниченности в бездефектных h-BN монослоях не существует. При этом авторы [1] получили спонтанную намагниченность в присутствии примесей замещения (C_B , C_N) или вакансий (V_B , V_N) в структуре h-BN. Это объясняется тем, что при удалении атома азота из монослоя h-BN, структура имеет только один непарный электрон, а при удалении атома бора в системе присутствует три непарных электрона. Монослой h-BN содержащий B_N или N_B дефект не обладает спиновой поляризацией.

В представленной работе проводилось исследование магнитных свойств вакансий в монослое h-BN. В частности, исследовалось влияние расстояния между вакансиями на переход из ферромагнитного состояния в антиферромагнитное, и наоборот.

Расчеты проводились в рамках формализма теории функционала плотности DFT (Density Functional Theory) [2] с градиентными поправками PW91 (Perdew – Wong) с использованием пакета VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) [3-5]. В ходе вычислений применялся ультрамягкий псевдопотенциал Вандербиля (Vanderbilt ultrasoft pseudopotential) [6].

На первом этапе исследовался монослой h-BN без вакансий. Моделировались гексагональная элементарная ячейка, содержащая два атома. Рассматривалось три вида суперячеек монослоя h-BN с вакансиями, содержащих $6 \times 6 \times 1$ (68 атомов), $8 \times 8 \times 1$ (124 атома), $10 \times 10 \times 1$ (196 атомов) элементарных ячеек. Каждая смоделированная суперячейка содержала четыре вакансионных дефекта. Подобные суперячейки были выбраны, чтобы выполнить условие равномерного удаления вакансий друг от друга в ячейке.

Значение вакуумного промежутка (15 Å) подбиралось исходя из предположения, что на данном расстоянии монослои, находящиеся в соседних суперячейках, не будут оказывать влияния друг на друга. Обратное пространство в первой зоне Брлюлюэна автоматически разбивалось на сетку по схеме Монхорста-Пака [7], количество k-точек вдоль каждого из направлений составляло $6 \times 6 \times 1$. Для каждой из структур проводилась оптимизация геометрии до значения силы действующей на атом величиной 10^{-2} eV/Å.

Исследовалось ферромагнитное, антиферромагнитное и немагнитное состояния. Ферромагнитное состояние было получено автоматически при использовании спин-поляризованного расчета. Антиферромагнитное состояние задавалось с помощью чередования магнитных моментов на атомах, окружающих вакансию. Для сравнения, для каждой из структур, рассчитывалось немагнитное состояние, в котором суммарный магнитный момент был равен нулю. Установлено, что немагнитное состояние является энергетически невыгодным.

Для монослоев h-BN магнитный момент в системе появляется при наличии вакансий, как бора, так и азота. В обоих случаях, атомы, окружающие вакансию равноудалены друг от друга. Спиновая плотность равномерно распределена на атомах, окружающих вакансию, при этом проекции спинов имеют одинаковое направление (рис. 1).

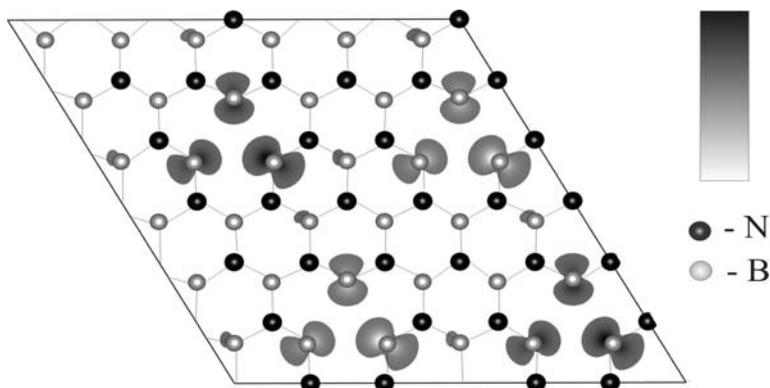


рис. 1 Распределение спиновой плотности для антиферромагнитного состояния h-BN с вакансией азота

В случае вакансии бора наблюдается переход от антиферромагнитного к ферромагнитному упорядочению. Для монослоя h-BN с вакансией азота характерна обратная ситуация, т.е. переход от ферромагнитного к антиферромагнитному состоянию. В случае вакансии азота значение магнитного момента существенно не изменяется в зависимости от расстояния между вакансиями. Данное явление объясняется электрон-дефицитным состоянием атомов бора, окружающих вакансию азота.

В ходе проведенных исследований было установлено, что присутствие вакансий в монослое h-BN приводит к появлению магнитного момента. Показано, что исследуемая система является магнитно упорядоченной. При увеличении расстояния между вакансиями возможен переход от антиферромагнитного к ферромагнитному состоянию и наоборот, в зависимости от типа вакансий.

Список публикаций:

- [1] S. Azevedo, J.R. Kaschny et al., *Eur. Phys. J. B* 67, 507 (2009).
- [2] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* 140, 1133 (1965).
- [3] G. Kresse and J. Hafner, et al., *Phys. Rev. B* 47, 558 (1993).
- [4] G. Kresse and J. Hafner, et al., *Phys. Rev. B* 48, 13115 (1993).
- [5] G. Kresse and J. Hafner, et al., *Phys. Rev. B* 49, 14251 (1994).
- [6] D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* 41, 7892 (1990).
- [7] H.J. Monkhorst, J. D.Pack, *Phys. Rev. B* 13, 5188 (1976).

Магнитные свойства соединений оксидов кобальта

Ситников Максим Николаевич¹

Сергей Степанович Аплеснин^{1,2}, Любовь Викторовна Удод^{1,2}, Дмитрий Анатольевич Великанов²

¹*Сибирский государственный аэрокосмический университет им. академика М.Ф. Решетнева*

²*Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН*

Аплеснин Сергей Степанович

kineru@mail.ru

Соединения со смешенной валентностью проявляют необычные магнитные и электрические свойства, например, манганиты $\text{La}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$ ($\text{A}=\text{Sr}, \text{Ca}, \text{Ba}$) [1,2], в которых наблюдается орбитальное, спиновое и зарядовое упорядочение. Для хорошо исследованных оксидов железа Fe_3O_4 [3,4] с зарядовым упорядочением в магнитоупорядоченной области, характерна высокая проводимость, в частности, обусловленная двух- и трехвалентными ионами железа в октаэдрических позициях и небольшими расстояниями между этими катионами. Магнитные и электрические свойства в этих соединениях с зарядовым упорядочением обусловлены электронами 3d металлов, для которых возможна сильная взаимосвязь между магнитными, электрическими и упругими свойствами. Зарядовое упорядочение может сформироваться в результате снятия орбитального вырождения электронов в 3d состояниях за счет нескольких механизмов: спин-орбитального взаимодействия, взаимодействия с фононными модами колебаний кристаллического поля. Выделить основной механизм, который приводит к образованию зарядового упорядочения в этих системах довольно сложно. Чтобы избавиться от сопутствующих взаимодействий, и рассмотреть зарядовое упорядочение как переход в электронной системе, рассмотрим электроны в s-состояниях. К таким соединениям можно отнести $\text{Bi}_{24}(\text{CoBi})\text{O}_{40}$, в котором существуют ионы висмута с заполненной $6s^2$ и пустой $6s$ оболочкой.

Исследование магнитных свойств были проведены на установке Quantum Desing MPMS XL в интервале температур $4 \text{ K} < T < 300 \text{ K}$ со скоростью нагрева образцов 4 град/мин. Кривая магнитной восприимчивости оксида кобальта имеет максимум при температуре $T=39 \text{ K}$, а максимум производной $d\chi/dT$ наблюдается при $T=32 \text{ K}$. Магнитные свойства Co_3O_4 хорошо изучены и некоторые авторы связывают температуру $T_{\chi\text{max}}$ с температурой Нееля $T_N \approx 40 \text{ K}$, другие с температурой максимума производной $d\chi/dT$ [5], где теплоемкость имеет пик при $T=30 \text{ K}$. Магнитная восприимчивость однофазного образца $\text{Bi}_{24}(\text{CoBi})\text{O}_{40}$ (χ_1) найдена путем вычитания величины магнитной восприимчивости оксида кобальта (χ_2) с учетом весового соотношения из восприимчивости двухфазного образца $\chi_1 = \chi - 0.23\chi_2$. Температурная зависимость обратной восприимчивости $1/\chi_1$ для однофазного образца $\text{Bi}_{24}(\text{CoBi})\text{O}_{40}$ в интервале температур $4 \text{ K} < T < 300 \text{ K}$, хорошо описываются законом Кюри - Вейса с отрицательной парамагнитной температурой Кюри $\theta = -12.3 \text{ K}$ и эффективным магнитным моментом $\mu = 5.08\mu_B$. На основании этих данных можно предположить, что магнитный момент однофазного образца $\text{Bi}_{24}(\text{CoBi})\text{O}_{40}$ обусловлен спинами трехвалентных ионов кобальта, находящихся в тетраэдрических позициях с $S=2$. Отсутствие дальнего магнитного порядка для однофазного $\text{Bi}_{24}(\text{CoBi})\text{O}_{40}$ при $T > 4 \text{ K}$ возможно связано со спин-фононным взаимодействием, которое уменьшает температуру Нееля и при некотором критическом параметре взаимодействия, дальний магнитный порядок исчезает, сохраняется только ближний порядок, который также дает конечную величину парамагнитной температуры Нееля.

Для выяснения влияния внешнего магнитного поля, проведены измерения магнитного момента в интервале полей $-5 \text{ Т} < \text{H} < 5 \text{ Т}$ при температурах $\text{T}=5 \text{ К}$ и $\text{T}=300 \text{ К}$. Зависимость $\text{M}(\text{H})$ для Co_3O_4 в магнитоупорядоченном состоянии при $\text{T}=5 \text{ К}$ типична для поликристаллического антиферромагнетика, а при комнатных температурах $\text{M}(\text{H})$ – для парамагнетика. Магнитный момент однофазного образца также определен путем вычитания $\text{M}(\text{T})_{\text{Bi}_{24}(\text{CoBi})\text{O}_{40}} = \text{M}(\text{T})_{0.77\text{Bi}_{24}(\text{CoBi})\text{O}_{40}\cdot 0.23\text{Co}_3\text{O}_4} - \text{M}(\text{T})_{0.23\text{Co}_3\text{O}_4}$. Взаимодействие спиновой и упругой подсистем проявляется в исследованиях методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР).

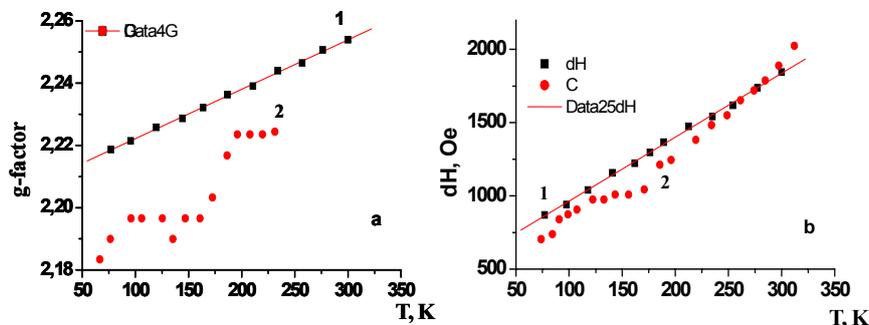


рис. 1. Температурная зависимость g-фактора – a и ширины линии ЭПР – b для $\text{Bi}_{24}(\text{CoBi})\text{O}_{40}$ (1) и Co_3O_4 (2)

Магнитный ион кобальта в обоих соединениях находится в тетраэдрическом окружении. Температурные зависимости g- фактора и ширины линии ЭПР для двухфазного образца $\text{Bi}_{24}(\text{CoBi})\text{O}_{40}$ и оксида кобальта приведены на (рис.1). При нагревании резонансное поле уменьшается, а величина g- фактора растет от $g=2.22$ до $g=2.25$. Рост g-фактора в оксиде кобальта, на данный момент не имеет объяснения, а в $\text{Bi}_{24}(\text{CoBi})\text{O}_{40}$, возможно, это связано с локальными структурными искажениями при изменении валентности висмута и уменьшении радиуса иона, что приведет к понижению локальной симметрии на ионе. Ширина линии ЭПР в двух соединениях в пределах 16% совпадает, линейно растет с температурой и аппроксимируется линейной функцией $d\text{H}=528+11\text{T}$, что указывает на взаимодействие спинов с фононами.

Влияние однофононного процесса проявляется в прямо пропорциональной зависимости ширины линии от температуры, а двухфононного – в квадратичной (T^2) зависимости. Ширина линии $d\text{H}$ для поликристаллического образца описывается уравнением $d\text{H}=C/\text{T}\chi [\text{K}(\text{T})]+f(\tau)$, где C – константа Кюри, $\text{K}(\text{T})$ не критический член, возникающий в результате спин-фононного взаимодействия и $f(\tau)$ критический вклад вблизи температуры Нея, в результате образования ближнего магнитного порядка $\tau=(\text{T} - \text{T}_\text{N})/\text{T}_\text{N}$. Для $\text{T} \gg \theta$ температурные зависимости $d\text{H}$ и $\text{K}(\text{T})$ совпадают. Форма линии ЭПР является немного ассиметричной, так полуширины линии $\Delta\text{H}1/2$ и $\Delta\text{H}2/2$ справа и слева от резонанса отличаются на 10 Э, т.е. отличие находится в пределах одного процента от ширины линии и обусловлено близлежащими резонансами от спинов кобальта в Co_3O_4 и в $\text{Bi}_{24}(\text{CoBi})\text{O}_{40}$, у которых g- факторы отличаются также в пределах одного процента. Релаксация спиновых моментов осуществляется через упругую систему. Трехвалентный ион кобальта относится к Ян-Теллеровским ионам и орбитальное вырождение может быть снято вследствие динамического взаимодействия с модами колебаний тетраэдра или посредством образования орбитального упорядочения электронов, что приведет к анизотропии спин-спиновых корреляционных функций и величина g-фактора будет отлична от $g=2$ на величину Δg , которая пропорциональна анизотропии обмена $\Delta g \sim ((J_z - J_\perp)/J_z)^2$.

В соединении $\text{Bi}_{24}(\text{CoBi})\text{O}_{40}$, имеющим ионы висмута Bi^{5+} и Bi^{3+} с заполненной и пустой 6s оболочкой, магнитные свойства обусловлены ионами кобальта со слабым антиферромагнитным взаимодействием. В парамагнитном состоянии обнаружено сильное спин-фононное взаимодействие, которое приводит к росту ширины линии ЭПР.

Авторы искренне признательны Геннадию Семеновичу Патрину за содействие в проведении магнитных измерений, Воротынову Александру Михайловичу за проведение резонансных измерений методом ЭПР.

Список публикаций:

- [1] A. Sadoc, B. Mercey *Phys. Rev. Lett.* 104, 046804 (2010).
- [2] F. Masee, S. de Jong *Nature Physics*, 2011
- [3] K. Yamauchi *Phys. Rev. B* 79, 212404 (2009).
- [4] A. A. Fursina, R. G. S. Sofin, I. V. Shvets, and D. Natelson *Phys. Rev. B* 81, 045123 (2010).
- [5] A. Maitre, M. Francois, J.C. Gashon. *J. Phase Equilibria Diffusion* 25, 59 (2004).

Магнитоэлектрический трансформатор с увеличенным диапазоном рабочих частот

Соловьев Александр Николаевич

М. И. Бичурин

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого

Магнитоэлектрические трансформаторы (МЭТ) обладают целым рядом преимуществ, но при этом у них есть существенный недостаток, такой как узкая полоса рабочих частот. Цель данной работы заключается в определении метода увеличения диапазона рабочих частот и коэффициента трансформации (КТ) МЭТ. Основными задачами, поставленными перед этой работой, являются составление эквивалентной схемы МЭТ, определение формулы для расчета КТ, математическое и компьютерное моделирование МЭТ в программе Maple для определения оптимального метода.

В проекте рассматривается МЭТ конструкции Розена с дополнительной магнитоотрицательной секцией. На основе данной конструкции проводятся математические расчеты и моделирование. Основными параметрами, характеризующими МЭТ, являются резонансная частота, диапазон рабочих частот, коэффициент трансформации, коэффициент полезного действия (КПД). Особое внимание заслуживает КТ МЭТ и диапазон рабочих частот.

В проекте была составлена электрическая эквивалентная схема МЭТ. При её анализе методом электромеханических ассоциаций была определена формула для расчета КТ.

При детальном рассмотрении полученной формулы видно, что КТ МЭТ сильно зависит от параметров пьезоэлектрического материала, магнитоотрицательного материала и конструктивного исполнения.

Были определены основные факторы, влияющие на величину КТ, максимальное значение которого достигается в области электромеханического резонанса, который определяет диапазон рабочих частот. Отсюда следует, что для увеличения эффективности МЭТ необходимо расширить диапазон рабочих частот. Существенного расширения можно добиться за счет применения многослойной структуры возбудителя с различными геометрическими размерами слоев. В данном проекте рассматривались однослойная, трёхслойная и пятислойная структура. После проведения математических расчетов и моделирования в программе Maple были получены зависимости коэффициента трансформации от частоты для одного, трех и пяти слоев возбудителя ПЭТ.

Из анализа полученной зависимости были сделаны следующие выводы:

- а) ширина диапазона рабочих частот и КТ для однослойной структуры составляет 1,2 кГц и 6200, для трехслойной – 2,8 кГц и 9300, для пятислойной - 4,6 кГц и 10800;
- б) с увеличением количества слоев возбудителя происходит существенное увеличение КТ и расширение диапазона рабочих частот;
- в) коэффициент полезного действия образцов практически не зависит от количества слоев и составляет 95%.

Полученные результаты показывают возможность увеличения диапазона рабочих частот более чем в 3 раза и коэффициента трансформации более чем на 80%. КПД остается неизменным на всем диапазоне рабочих частот, тем самым улучшается эффективность МЭТ конструкции Розена с дополнительной магнитоотрицательной секцией. Следующим этапом проверки данного метода будет служить постановка эксперимента и получение экспериментальной зависимости коэффициента трансформации от частоты с различным количеством слоев возбудителя.

Магнитоэлектрический сборщик сверхвысокочастотной энергии

Соловьев Иван Николаевич

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого

Бичурин Мирза Имамович, д.ф.-м.н.

ivan.solessi@gmail.com

Цель данной работы заключается в исследовании и разработке магнитоэлектрического (МЭ) сборщика сверхвысокочастотной энергии, работающего в диапазоне частот в пределах 1850-1990 МГц. Актуальность таких исследований в области энергетики и энергоэффективности, а именно в разработке автономных источников энергии для маломощных устройств электроники особенно велика, поскольку подобные устройства содержат в себе элемент питания, требующий периодической замены либо подзарядки.

Данный диапазон частот выбран не случайно, он соответствует наиболее распространенным цифровым стандартам CDMA/GSM для мобильной сотовой связи, в диапазонах которых происходит передача электромагнитной энергии от базовых станций.

МЭ сборщик СВЧ энергии способен преобразовывать энергию от внешних источников энергии: внешних электромагнитных полей и источников механических колебаний. В предлагаемом устройстве собранная из окружающей среды электромагнитная энергия преобразуется и усиливается за счет использования специфических явлений, присущих особой МЭ структуре, и за счет внутренних свойств материалов МЭ резонатора. В работе устройства используются сразу несколько эффектов: МЭ эффект в области электромеханического резонанса (ЭМР); МЭ эффект в области ферромагнитного резонанса (ФМР); МЭ эффект в области магнитоакустического резонанса (МАР).

МЭ эффект в композиционных материалах представляет собой так называемый «вторичный» эффект в цепочке «магнитострикция – упругая деформация – пьезоэлектрический эффект». Благодаря магнитострикции при воздействии магнитного поля в ферритовом компоненте создаются упругие напряжения, которые передаются в пьезоэлектрическую фазу и изменяют поляризацию вследствие пьезоэлектрического эффекта. Поскольку МЭ эффект в композитах наблюдается в механически связанных магнитострикционной и пьезоэлектрической компонентах, то он резко увеличивается вблизи частоты ЭМР.

Данное устройство представляет собой систему, состоящую из нескольких модулей: приемный модуль, который отвечает за сбор электромагнитной энергии из окружающего пространства; резонаторный модуль, выполняющий двойную функцию преобразования и усиления поступающей энергии; модуль управления, предназначенный для создания постоянных магнитных полей смещения и управления, а также дополнительных условий для осуществления усиления мощности; модуль выпрямления, отвечающий за конвертирование переменной СВЧ мощности в постоянный электрический ток; аккумуляторный модуль, предназначенный для сбора, хранения и передачи поступающей электрической энергии к маломощным устройствам электроники.

На данном этапе работы были проведены математические расчеты МЭ эффекта с использованием компьютерной программы Maple, была разработана структурная схема МЭ сборщика сверхвысокочастотной энергии. Теоретическая модель, построенная в данной работе, основана на точном решении уравнений движения среды и использует материальные параметры исходных компонентов структуры, а также одновременное решение уравнений эластодинамики, электростатики, электродинамики и магнитостатики.

МАР наблюдается в том случае, когда частота ЭМР совпадает с частотой ФМР. При этом ЭМР происходит в электрической подсистеме, а ФМР – в магнитной. За счет совмещения ФМР и ЭМР величина МЭ эффекта увеличивается в десятки раз, при этом происходит передача энергии между фононами, спиновыми волнами, электрическим и магнитным полями.

На частоте ФМР из МЭ резонатора при определенной ориентации управляющих магнитных полей за счет особой конструкции резонаторного модуля реализуется магнитостатический ферритовый усилитель с непрерывной накачкой малой мощности. Если приложить постоянное магнитное поле в том же направлении, что и сигнал накачки, то в слое ЖИГ можно параметрически возбудить определенный тип спиновых волн на частоте, равной половине частоты накачки.

Поскольку принцип работы устройства состоит в одновременном выполнении ряда явлений, то требуется прецизионность в настройке МЭ резонатора. Поэтому в будущем планируется проведение экспериментальных исследований МЭ резонатора и остальных модулей МЭ сборщика СВЧ энергии при различных условиях.

Механизмы лазерного испарения серебра в режимах синтеза наноструктур.

Старинский Сергей Викторович

Евтушенко Антон Борисович, Шухов Юрий Геннадьевич, Булгаков Александр Владимирович

Новосибирский государственный университет

Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН

Булгаков Александр Владимирович, д.ф.-м.н.

starikhbz@mail.ru

Материалы на базе наноструктурированного серебра привлекают к себе все большее внимание. Наночастицы и наноструктурированные пленки Ag проявляют уникальные оптические, бактерицидные и каталитические свойства и являются перспективными для применения в наноплазмонике, медицине и современной химической промышленности. Один из наиболее перспективных методов получения наноструктур – метод импульсной лазерной абляции (ИЛА). К достоинствам метода можно отнести

принципиальную чистоту получаемого материала, универсальность, возможность контроля процесса роста. Метод ИЛА широко используется для получения тонких пленок и нанокластеров благородных металлов (в том числе и серебра), однако контролируемый синтез наноструктур с заданными свойствами остается исключительно сложной задачей, а сами свойства (состав, размер, геометрия) получаемых образцов сильно зависят от условий синтеза.

Данная работа посвящена экспериментальному и теоретическому исследованию ИЛА серебра в вакууме и в фоновом газе под действием наносекундных лазерных импульсов видимого диапазона (длина волны 532 нм) умеренной интенсивности (1-10 Дж/см²) в условиях характерных для напыления наноструктурных пленок. Основное внимание уделено анализу механизмов лазерного испарения серебра, а также формирования наноструктур Ag.

Исследование процесса абляции выполнено с применением целого ряда взаимодополняющих экспериментальных методик. Методом времяпролетной масс-спектрометрии получены данные о выходе и составе продуктов абляции в вакуум, о скорости осаждаемых нейтральных и заряженных частиц, а также оценена степень ионизации лазерной плазмы. Прямыми весовыми измерениями удаленной массы найдена зависимость глубины абляции от интенсивности излучения. С помощью кварцевых резонаторов для различных режимов получены угловые распределения испаренных частиц. Теоретический анализ процесса абляции серебра выполнен с использованием тепловой модели испарения. Модель основана на решении уравнения теплопроводности с учетом неоднородного (гауссового) распределения энергии в лазерном пучке и поглощения энергии как падающего, так и отраженного излучения лазера плазмой, образованной продуктами испарения [1].

Фотография типичной наноструктурной пленки серебра, синтезированной методом ИЛА в вакууме, показана на Рис. 1 (характерный размер наноструктур ~ 5 нм). Детальный анализ пленок методами сканирующей и просвечивающей электронной микроскопии показал, что абляция серебра происходит не только тепловым образом. Обнаружено, что в состав пленок, напыленных при низких интенсивностях излучения (менее 5 Дж/см²), входят, наряду с наночастицами, частицы с характерным размером ~ 1 мкм. При больших интенсивностях облучения такие микрочастицы практически не наблюдаются.

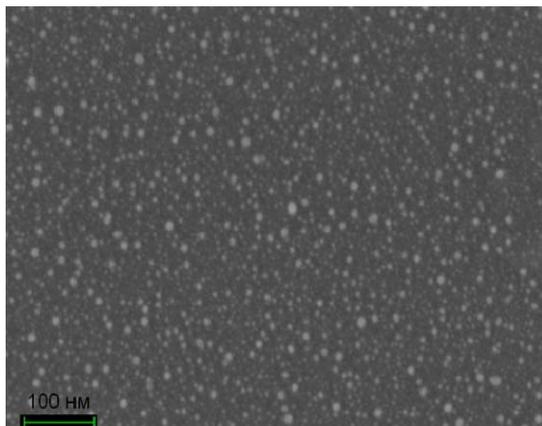


рис. 1. Наноструктурная пленка серебра, полученная методом ИЛА

Для выявления механизмов образования микроскопических частиц было проведено исследование морфологии облученной поверхности при различных режимах ИЛА. Найдено, что изначально полированная поверхность после облучения всегда имеет структуру в виде капиллярных волн (рис. 2). Это свидетельствует о развитии неустойчивости (типа Релея-Тейлора или/и Кельвина-Гельмгольца) поверхности в период ее расплавленного состояния, приводящей к эмиссии микрокапель [2]. Характерный размер волновой структуры поверхности тем меньше, чем ниже интенсивность излучения (рис.2). Анализ динамики плавления серебра показал, что причиной изменения характера развития неустойчивости при данных режимах облучения является разница в величине дестабилизирующей силы, которая определяется ускорением фронта плавления. Оценка величины дестабилизирующей силы на основе тепловой модели свидетельствует, что для 2 и 8 Дж/см² она отличается более чем на порядок. Таким образом, более крупные гребни не аккумулируют достаточное количество энергии для отрыва и достаточно высокой интенсивности излучения абляция становится чисто тепловой.

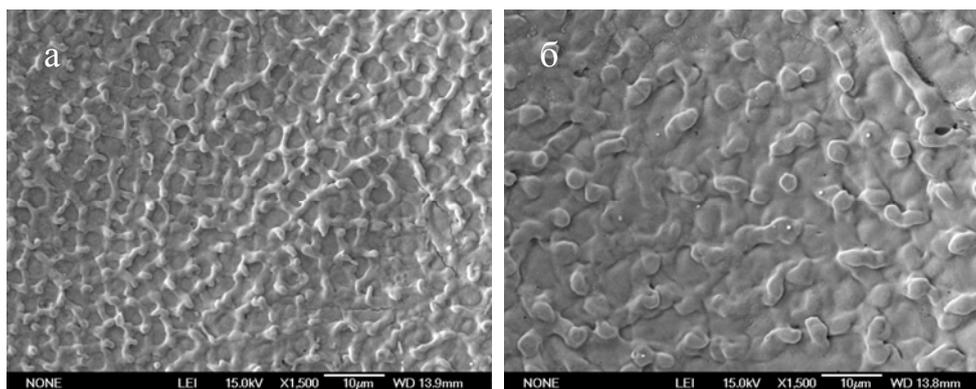


рис.2. Поверхность мишени после облучения плотностью энергии 2 Дж/см² (а) и 8 Дж/см² (б)

Проведено напыление наноструктурных пленок при абляции в фоновом газе (кислороде). Найдено, что средний размер частиц на поверхности подложки зависит от давления газа. Так, что при давлении 50 Па функция распределения частиц по размерам имеет наименьшую дисперсию, а средний размер составил 3 нм. Таким образом, выявлен эффективный способ контроля над процессом формирования кластеров.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 10-03-00441).

Список публикаций:

[1] Булгаков А.В., Булгакова Н.М. // Квантовая электроника. – 1999. – Т. 27, № 2. – С. 154–158.

[2] Braiovsky A.B., Garonov S.V., Luchin V.I. // Applied Physics A. – 1995 – A61, - С. 81-86.

Влияние поверхностно-активных веществ разных концентраций на силу абразивного трения, сошлифованную массу и энергию диспергирования никеля

Суворов Андрей Леонидович

Южно-Уральский государственный университет

Соколова Наталья Марковна, к.ф.-м.н.

als_2991@mail.ru

Энергетические затраты на механическое измельчение вещества удобно характеризовать величиной работы, затраченной на превращение единицы массы вещества в порошок. Если вещество измельчается трением об абразив, работа может быть найдена произведением силы трения F на пройденный путь l . Взвешиванием образца до и после опыта, находится масса образовавшегося порошка - m . Удельную энергию диспергирования определим так [1]:

$$a = \frac{Fl}{m} \quad (1)$$

Анализ процессов, происходящих при образовании мелкодисперсной фазы в процессе абразивного трения, позволяет представить a в виде суммы [2].

$$a = a_v + a_\sigma, \quad (2)$$

где a_v - есть энергия деформационных процессов, происходящих по всему объему вещества; a_σ - энергия, связанная с образованием новых поверхностей.

Величина a находится из опыта и составляет для никеля $a = 3,12 \text{ МДж/кг}$. Значения a_σ оказались на шесть порядков ниже – $4,36 \text{ Дж/кг}$. Порядок a_σ оценивается по табличным значениям удельной поверхностной энергии σ , плотности вещества ρ и среднему линейному размеру частиц износа [2]. Очевидно, в уравнении (2) вторым членом можно пренебречь и признать, что затраченная при диспергировании твердого тела энергия есть энергия деформационных процессов.

$$a = a_v \quad (3)$$

Вместе с тем известно, что введение поверхностно-активных веществ облегчает механическое разрушение. Этим широко пользуются на практике при механическом дроблении вещества в шаровых мельницах. На a эти вещества могли бы влиять в том случае, если бы a_{σ} была соразмерна с a .

Объяснить влияние ПАВ на величину удельной энергии диспергирования можно тем, что под действием ПАВ уменьшается сила трения. Определение ее среднего значения затруднительно из-за самой природы трения, его скачкообразности. Замена используемого нами ранее силоизмерителя на электронный, позволяет решить этот вопрос. Ниже мы сопоставляем действие ПАВ на удельную энергию диспергирования и силу трения.

В качестве ПАВ мы брали спирт. Добавки стеариновой кислоты должны усиливать его влияние. Зависимость a от введения в зону трения спирта с различным процентным содержанием стеариновой кислоты представлена на (рис.1). Каждая точка на рисунке, есть результат усреднения 3 – 5 опытов. Кривая имеет вид гипсовской изотермы адсорбции. Введение спирта существенно понижает a . Малые добавки (0,2%) стеариновой кислоты усиливают его влияние.

Действие этих же веществ на силу трения аналогично (рис.2). Отметим, что при концентрации 0,5% и выше, наблюдаются незакономерные существенные изменения этой величины. Объяснения этих скачков могут быть различными, мы остановимся на одном из них после проведения дополнительных опытов.

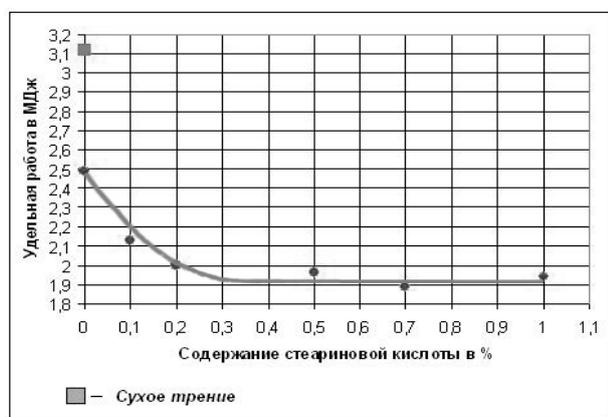


рис.1. Зависимость удельной энергии от содержания стеариновой кислоты в спирте 1

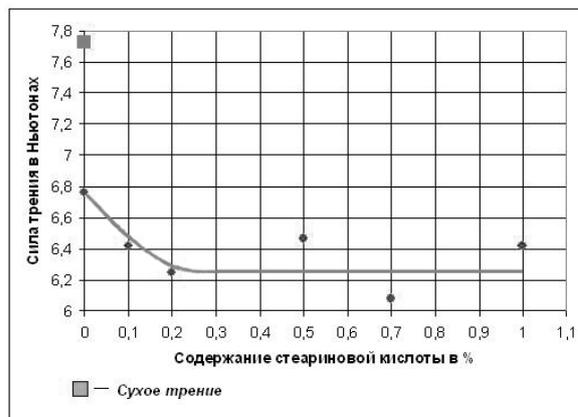


рис.2. Зависимость силы трения от содержания стеариновой кислоты в спирте

Сравнивая рисунки 1 и 2, заметим, что величина a меняется больше (в 1,63 раза), чем при тех же условиях меняется сила (в 1,24 раза). Значит, объяснить влияние ПАВ на удельную работу действием их только на силу трения нельзя. Действительно ПАВ вызывают увеличение массы образовавшегося порошка. Очевидно, что действие ПАВ на a есть результат совокупного изменения силы трения и сошлифованной массы.

Сопоставляя полученный результат с уравнением (3) мы вынуждены признать, что введение ПАВ меняет энергию деформационных процессов. Механизм этого влияния пока не ясен.

Список публикаций:

[1] Соколова Н. М., Белова М. Е. // Некоторые закономерности абразивного износа. 2008. С.61-63
 [2] ВНКФС-17 // Материалы конференции. Информационный бюллетень. Екатеринбург. 2011. С.126-127

Исследование наночастиц 3-d металлов полученных с помощью органического синтеза методом электронно-парамагнитного резонанса

Трубникова Лилия Валерьевна

Гуревич Юрий Леонидович

Сибирский федеральный университет

Петраковская Элеонора Анатольевна, к.ф.-м.н.

lilia_trub@mail.ru

В настоящее время весьма актуален вопрос исследования наноструктур различного состава, свойств и способов их получения. Метод электронно-парамагнитного резонанса (ЭПР) является одним из основных методов изучения парамагнитных частиц, присутствующих в биологических системах.

На данном этапе технологии синтеза магнитных наночастиц в подавляющем числе случаев основаны на физико-химических и биологических методах обработки исходных реагентов. Вместе с этим известно, что

ферригидрит и другие гидрооксиды железа, которые наблюдаются в природных объектах, часто образуются при участии микроорганизмов. Таким образом, целью данной работы явилась разработка метода получения нанокристаллического ферригидрита с суперпарамагнитными свойствами в культурах бактерий.

В данной работе исследованы бактерии, выращенные в периодическом режиме при перемешивании и аэрации воздухом на минерально-солевой среде, содержащей необходимые для их роста азот, фосфор, калий, магний и серу. В качестве источника углерода и энергии использовали цитрат железа (железо лимоннокислое). Рост бактерий при периодическом культивировании характеризует классическая S-образная кривая.

Разработанная технология позволяет получать достаточно большие массы суперпарамагнитного ферригидрита для исследований сверхтонкой структуры гидроксидов железа и различных приложений. Сверхтонкая структура нанокристаллического ферригидрита существенно зависит от концентрации железа в питательной среде. Определенное влияние оказывает фаза роста культуры бактерий. Обеспеченность бактерий кислородом и pH культуры не являются основными факторами, влияющими на структуру образующегося нанокристаллита.

На рис.1 показан спектр ЭПР для порошков гидроксида Fe – биогенный материал, полученный в среде NaCl. После очистки от органики был получен спектр, характерный для суперпарамагнитных наночастиц.

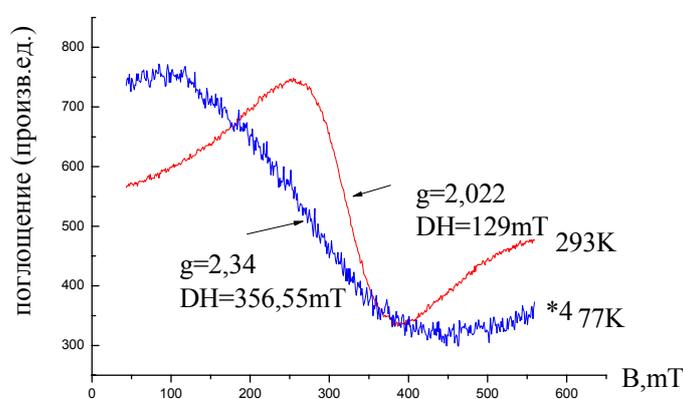


рис.1. Спектр ЭПР гидроксида Fe

При добавлении в питание Ni и Co получают частицы более сложного состава, содержащие все элементы, вносимые в питание. В случае с Ni видим образование очень мелких кластеров (менее 1 нм). На рис.2 приведен спектр продукта, произведенного бактериями при питании смесью: Fe + Ni. Отличие g-факторов спектров свидетельствует о том, что никель вошел в состав полученных продуктов вместе с Fe. Уменьшение ширины линии связано с повышением однородности полученного материала и его уплотнением.

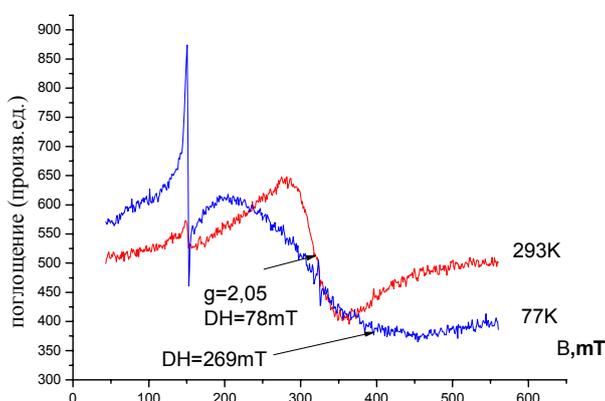


рис.2. Спектр ЭПР Fe+Ni

В результате нашего исследования было установлено, что наночастицы, полученные посредством «биологического синтеза», обладают суперпарамагнитными свойствами, а, значит, имеют размеры порядка единиц нанометра.

Электронная структура кристаллов CuBS_2 и CuGaS_2

Филиппов Семён Игоревич

Гордиенко Алексей Болеславович

Кемеровский государственный университет

Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.

filippov_sem@kemsu.ru

Рассматриваемые в данной работе кристаллы имеют алмазоподобную структуру семейства халькопирита (CuFeS_2) и представляют собой большой практический интерес. Первый - CuBS_2 , тиоборат меди - был синтезирован недавно [1], он является перспективным материалом для применения в тонкопленочных солнечных батареях. CuBS_2 среди семейства халькопирита имеет самую широкую запрещенную зону (3,61 эВ [1]) и является единственным ее представителем, в структуре которого присутствуют тетраэдры BS_4 [1]. Кристалл CuGaS_2 характерен шириной запрещенной зоны в 2,49 эВ [2], что позволяет использовать его в оптоэлектронике, в частности, в полупроводниковых лазерах, излучающих в зеленой области спектра. Кроме того, комбинация этих соединений, CuBS_2 и CuGaS_2 , также может быть использована при создании солнечных элементов [2].

Расчет электронной структуры кристаллов был выполнен в рамках теории функционала плотности в базе ПАО с использованием HGH-псевдопотенциалов. Вычисления проводились как в локальном приближении (LDA), так и с учетом градиентных (GGA) поправок к обменно-корреляционному потенциалу. В качестве градиентного потенциала был выбран модифицированный вариант потенциала Бекке-Джонсона (BJ, [3]), позволяющий получать ширины запрещенной зоны в диэлектриках, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными [4]. Для корректного описания локализованных 3d-состояний атомов меди в разложении базисных функций использовались плоские волны общим числом порядка $4 \cdot 10^4$. Спектры полной и проективной плотности состояний были вычислены линейным методом тетраэдров [5].

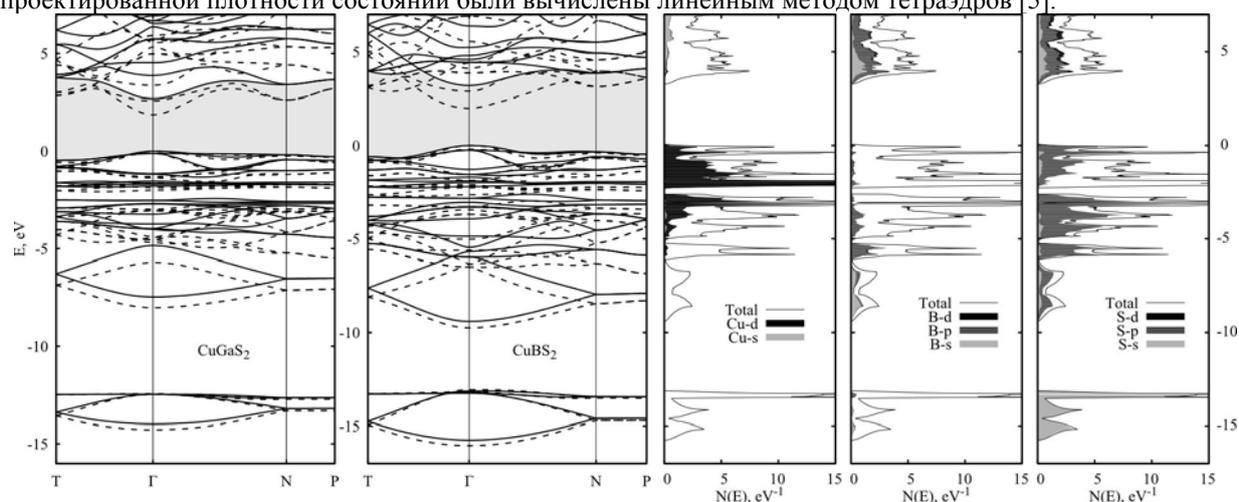


рис.1. Зонные структуры CuGaS_2 и CuBS_2 и плотность состояний в CuBS_2

На рис. 1 приведены совмещенные зонные структуры (GGA — сплошные линии и LDA — пунктир, за начало отсчета принята вершина валентной зоны) кристаллов CuGaS_2 и CuBS_2 , а также полная и проективные плотности состояний CuBS_2 . Спектры электронных состояний этих кристаллов являются достаточно близкими и имеют вид, характерный для соединений типа ABC_2 со структурой халькопирита [6]. Оба соединения являются псевдопрямоугольными, при этом кристаллическое расщепление в кристалле CuBS_2 составило порядка 0,25 эВ, а в CuGaS_2 — 0,1 эВ. Расчетное значение оптической ширины запрещенной зоны для CuBS_2 , полученное в LDA-приближении, равно 2,19 эВ (занижено относительно эксперимента на 39%), а в GGA — 3,45 эВ (отличается от экспериментального всего на 4%). Для кристалла CuGaS_2 расчет с потенциалом BJ дал ширину запрещенной зоны в 2,68 эВ — это также ближе к экспериментальному значению 2,49 эВ (различие 8%), чем в случае LDA-расчета (1,87 эВ, различие 25%), но здесь расчетное значение оказалось больше экспериментального.

Качественно картина вкладов в плотность электронных состояний является одинаковой для обоих рассматриваемых кристаллов (при замене B на Ga). Как видно из рис. 1, самая нижняя зона CuBS_2 в области энергий от -16.1 до -13.1 эВ содержит преобладающий вклад s-состояний атомов серы. Верхняя часть валентной зоны от -9,8 до 0 эВ имеет сложный гибридный характер, обусловленный взаимодействием атомных состояний всех типов атомов. Для CuBS_2 данная группа зон состоит преимущественно из p-состояний серы, s- и p-состояний бора (соответственно, галлия в CuGaS_2) и узких зон d-состояний атомов меди в верхней ее части.

При этом на примере d-зон хорошо видно второе отличительное свойство потенциала ВJ (после увеличения ширины запрещенной зоны по сравнению с LDA) — его более сильный, относительно LDA, локализирующий характер, особенно для соединений с переходными элементами. Зона проводимости также имеет смешанный характер. Абсолютный максимум валентной зоны и минимум зоны проводимости наблюдаются в точке Г.

Таким образом, теоретические результаты, впервые полученные для CuBS₂, указывают на значительное подобие его электронной структуры с известным кристаллом CuGaS₂, что позволяет считать тиоборат меди перспективным материалом с точки зрения его применения в полупроводниковой электронике, в частности, при создании солнечных элементов на низкоразмерных полупроводниковых гетероструктурах.

Список публикаций:

- [1] T. Kajiki, Y. Hayashi, H. Takizawa // *Materials Letters*, **61**, n. 11–12, pp. 2382–2384 (2007)
 [2] W.-J. Jeong, G.-C. Park // *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, **75**, pp. 93–100 (2003)
 [3] F. Tran, P. Blaha // *Phys. Rev. Lett.*, **102**, 226401 (2009)
 [4] С. И. Филиппов, А. Б. Гордиенко // *Актуальные проблемы физики твердого тела: сб. докл. Междунар. Науч. конф., 18–21 окт. 2011 г., Минск. В 3 т. — Минск: А. Н. Вараксин, 2011. — Т. 3, стр. 321–322*
 [5] G. Lehmann, M. Taut // *Phys. Status solidi B*, **54**, n. 2, p. 469 (1972)
 [6] Ю. М. Басалаев, А. Б. Гордиенко, А. С. Поплавной // *Известия высших учебных заведений. Физика*, **1**, с. 31 (2005)

Одностенные нанотрубки (4,3) и (5,3) из атомов золота в модели Хаббарда

Филиппова Елена Рудольфовна

Марийский государственный университет

Мионов Геннадий Иванович, д.ф.-м.н.

31aisha1986@rambler.ru

В последние годы одной из наиболее бурно развивающихся областей науки является физика и химия наноструктур. При этом значительный интерес уделяется материалам на основе наночастиц золота, которые находят применение в различных областях науки и техники. Из всех возможных типов структур золотых наночастиц нас будут интересовать золотые нанопроволки винтового типа, которые были синтезированы при температуре 150 К [1]. Эти однослойные трубчатые структуры получены истончением золотой фольги электронным пучком. Золотой полый нанопровод с малым диаметром, сохраняющий только одну оболочку [2], называется одностенной золотой нанотрубкой (SWGТ).

В настоящей работе вычислены и исследованы антикоммутирующие функции Грина одностенных золотых нанотрубок хиральностей (4,3) и (5,3) бесконечных размеров, построены дисперсионные кривые в рамках модели Хаббарда [3,4].

Гамильтониан наносистем имеет вид:

$$\hat{H} = \varepsilon \sum_{i=1}^N (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + \sum_{i \neq j, \sigma} B_{ij} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}) + U \sum_{i=1}^N n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

где $a_{f\sigma}^+$ и $a_{f\sigma}$ — ферми-операторы рождения и уничтожения электронов на узле f ($f = i, j$) со спином σ , $n_{f\sigma} = a_{f\sigma}^+ a_{f\sigma}$ — оператор числа частиц, ε — собственная энергия электрона, $B_{ij}(i-j)$ — интеграл переноса, описывающий перескоки электронов за счет кинетической энергии и кристаллического поля на ближайший соседний узел, U — энергия кулоновского отталкивания электронов на одном узле.

Уравнения движения для операторов рождения электронов в представлении Гейзенберга $a_{i\sigma}^+(\tau) = \exp(H\tau) a_{i\sigma}^+(0) \exp(-H\tau)$, где $\tau = it$ имеют вид:

$$\frac{d}{d\tau} a_{i\sigma}^+(\tau) = (\varepsilon + U \langle n_{i\bar{\sigma}} \rangle) a_{i\sigma}^+(\tau) + \sum_j B_{ij} a_{j\sigma}^+(\tau) + U \Delta n_{i\bar{\sigma}} a_{i\sigma}^+(\tau). \quad (2)$$

Совершив фурье-преобразование:

$$a_{i\sigma}^+ = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_k a_{k\sigma}^+ \exp(-ikr_i), \quad B_{ij} = \frac{1}{N} \sum_k B(k) \exp[-ik(r_i - r_j)] \quad (3)$$

решение для оператора рождения частицы $a_{k\sigma}^+(\tau)$, определяющее эволюцию квантовой системы, описываемой гамильтонианом (1), получим в виде:

$$a_{k\sigma}^+(\tau) = \left\{ (1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle) \exp[(\varepsilon + B(k))\tau] + \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle \exp[(\varepsilon + U + B(k))\tau] \right\} a_{k\sigma}^+(0) + \left\{ \exp[(\varepsilon + U + B(k))\tau] - \exp[(\varepsilon + B(k))\tau] \right\} \Delta n_{\bar{\sigma}} a_{k\sigma}^+(0). \quad (4)$$

Отметим, что нас интересует спектр элементарных возбуждений в системе, для этого необходимо вычислить фурье-образ функции Грина, полюса которой и будут определять интересующий нас спектр. Имея решение (4), можно показать, что фурье-образ антикоммутирующей функции Грина будет иметь вид:

$$\left\langle \left\langle a_{k\sigma}^+ | a_{k\sigma} \right\rangle \right\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{1 - \langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{E - \varepsilon - B(k)} + \frac{\langle n_{\bar{\sigma}} \rangle}{E - \varepsilon - U - B(k)} \right\}. \quad (5)$$

Полюса функций Грина (5) определяют энергетический спектр:

$$E_1 = \varepsilon + B(k), \quad E_2 = \varepsilon + U + B(k). \quad (6)$$

Зонная структура золотой нанотрубки описывается с помощью двумерного дисперсионного соотношения:

$$B(k_x, k_y) = B \left[2 \cos(k_x a) + 4 \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3} k_y a}{2}\right) \right], \quad (7)$$

Периодические граничные условия для волнового числа k_x , использованные для получения собственных значений энергии SWGT хиральности (n,m), определяют число разрешенных волновых векторов k_x в направлении окружности:

$$N a k_x = 2\pi q, \text{ где } q = 1, \dots, N. \quad (8)$$

Энергетическое дисперсионное соотношение для SWGT (5,3) получается при постановке разрешенных значений волнового числа k_x (8) в уравнение (7):

$$B(k) = B \left[2 \cos\left(\frac{2\pi q}{N}\right) + 4 \cos\left(\frac{\pi q}{N}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3} k a}{2}\right) \right], \quad (9)$$

где k – одномерный волновой вектор вдоль оси нанотрубки, N – соответствует символике хиральности, волновые числа q определены условием (8). Подставляя (9) в (6), получим графики энергетических спектров:

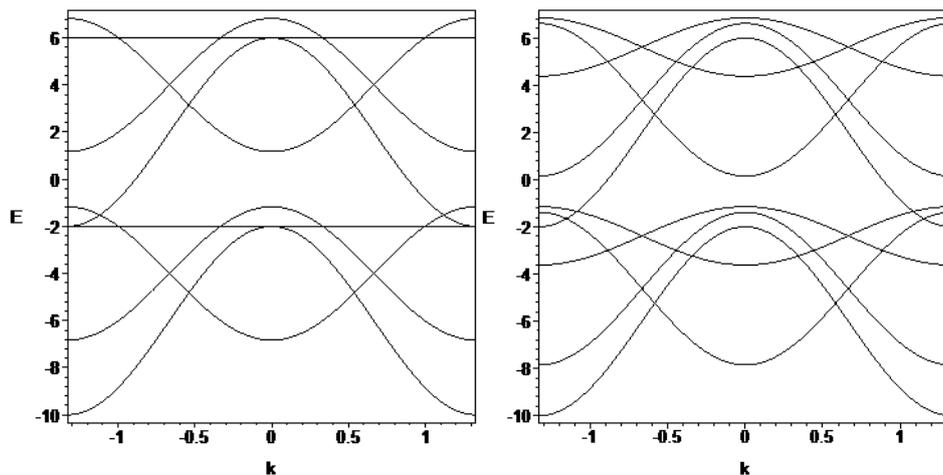


рис.1. Дисперсионные соотношения для а) (4,3) и б) (5,3) нанотрубок

Список публикаций:

- [1] Oshima Y., Onga A. and Takayanagi K., *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 205503 (2003).
- [2] Doye J.P.K., Wales D.J., *Cond. Mat.*, V. **11**, 38 (1997).
- [3] Hubbard J., *Proc. Roy. Soc., A* **276**, 238 (1963).
- [4] Миронов Г.И., Филиппова Е.Р., *ФНТ*, **37**, 6, с. 644 (2011).

Влияние многочастичного взаимодействия на образование плотноупакованных политипов в рамках аксиальной модели Изинга

Халяпкин Михаил Михайлович

Хакасский государственный университет им. Н.Ф.Катанова

Удодов Владимир Николаевич, д.ф.-м.н.

makon_19@mail.ru

Интерес к изучению природы образования политипных структур нарастает. Это явление может определяться множеством физических и термодинамических факторов, однако нет общего механизма политипообразования [1].

В последнее время широкое развитие получила аксиальная модель Изинга [1] в связи с возможностью объяснения на ее основе модулированных магнитных и политипных структур. Эта модель и ее модификации могут быть применены к слоистым плотноупакованным кристаллам.

В рамках аксиальной модели Изинга рассмотрим модельный кристалл, состоящий из плотноупакованных атомных слоев, в каждом из которых атомы образуют правильную треугольную решетку. В таком кристалле каждый слой может находиться только в одной из трех позиций А, В и С. Дополнительное ограничение вносит и принцип плотной упаковки: невозможно соседство атомных слоев в одинаковых позициях. Предполагаем, что взаимодействие атомов внутри слоя значительно превышает взаимодействие атомов из различных слоев. Вследствие этого каждый слой можно считать единым целым [2].

Такой плотноупакованный кристалл можно описать в рамках одномерной модели решеточного газа с числами заполнения $n_i = 1$ (есть “атом” в узле решеточного газа) и $n_i = 0$ (нет “атома” в узле) [3]. В реальном кристалле $n_i = 1$ соответствует смещению слоя относительно соседнего в одном направлении (последовательность АВ, ВС, СА), а $n_i = 0$ — в противоположном (АС, СВ, ВА). Таким образом, любую плотноупакованную структуру можно представить последовательностью нулей и единиц. Структура ГЦК имеет последовательность слоев ...АВСАВС..., которой будет соответствовать блок решеточного газа “...11111...” или “...00000...”-двойниковые модификации ГЦК; ГПУ, имеющую последовательность слоев ...АВАВАВ..., можно представить как “...10101...”.

Энергия модельных плотноупакованных политипов E рассчитывается по формуле [1]:

$$E = \frac{\varepsilon}{\omega_1} = \sigma \sum_i n_i + \sum_i n_i n_{i+1} + A_2 \sum_i n_i n_{i+2} + A_3 \sum_i n_i n_{i+3} + A_4 \sum_i n_i n_{i+4}, \quad (1)$$

где ε - энергия кристалла; ω_k - энергетический параметр взаимодействия атомов решеточного газа в k -м соседстве; σ - характеристика внешнего поля (поля внешних напряжений); $n_i = 0$ (1) - числа заполнения i -го узла; $A_k = \omega_k / \omega_1$ - относительный энергетический параметр взаимодействия k -х соседей в модельном решеточном газе.

В данной работе было проведено исследование влияние многочастичного взаимодействия и взаимодействия ближайших соседей на образование политипных структур и превращений в плотноупакованных кристаллах в рамках аксиальной модели Изинга [1-3]. Под многочастичным взаимодействием понимается такое, за которое отвечает относительный энергетический параметр A_4 гамильтониана (1), связанный с взаимодействием четвертых соседей в модельном одномерном решеточном газе, остальные параметры, строго говоря, также связаны с многочастичным взаимодействием атомов. Впервые были исследованы диаграммы основных состояний в координатах σ и A_2 для ансамблей блоков из 12-16 плотноупакованных плоскостей. В рамках модели возможны следующие случаи: во-первых, изменение относительного энергетического параметра A_4 ; во-вторых, одновременное изменение относительных энергетических параметров A_3 и A_4 .

Учет многочастичного взаимодействия A_4 в модельном решеточном газе для первого случая приводит к следующему. Независимо от числа узлов N стабилизируется политип 15R1 с двойниковой модификацией. При некоторых N с усилением рассматриваемого взаимодействия этот политип может быть в смеси со структурами 2H, 5H, 9R и 36Rx7, а также с их двойниковыми модификациями. Появляются новые стабильные структуры, которые без учета данного взаимодействия не реализовывались: 6H2, 30R3,4,7,13, 33Rx2, 36Rx1, (9T6+2H), 9T4, 10Tx4, 11Tx2,x4. Данные политипы делают возможным следующие политипные переходы: 3C-9R-36Rx1-33Rx2-9T4', 30R4'-30R4-18R3-3C, 11Tx2-18R3-3C, 3C-9R-(6H2+9R) -(9R'+15R1)-(9R'+5H'), а также двойникование через многослойные модификации 3C-15R1-33Rx1-33Rx2-(18R1'-24R3'-27R4')-24R3'(27R4')-3C', 3C-15R1-(9T6+2H)-15R1'-(15R1'+5H')-3C'.

При включении дополнительного взаимодействия третьих соседей в модельном одномерном решеточном газе происходят следующие изменения. Область стабильности структуры 15R1 может быть вырожденной. Возможны такие смеси: 15R1+6H1, 15R1+4H, 15R1+9T1,3, 15R1+18R3, 15R1+21R2. Становится стабильной область смеси политипов (4H+6H1) и (4H+6H2). Данное взаимодействие способствует стабилизации политипа 7T1, который находится в смеси со структурами 2H, 9T3, 18R3. Реализуется политип 12Tx9. Наблюдаются следующие политипные превращения: $3C'-7T1-(15R2+12R+2H)-15R1-9T3'$, $3C-12R-4H-(4H+6H2)$, $3C'-12Tx9'-6H121R2-3C$, $3C-7T1-(7T1+9T3)-(15R1+2H)-6H1-36R29'$.

Список публикаций:

[1] Удодов В.Н. Моделирование фазовых превращений в низкоразмерных дефектных наноструктурах / В.Н. Удодов, А.И. Потекаев, А.А. Попов и др.; под общ. ред. В.Н. Удодова. — Абакан: Издательство Хакасского государственного университета им. Н.Ф. Катанова, 2008. — 135 с.

[2] Николин Б.И. Многослойные структуры и политипизм в металлических сплавах [Текст] / Б.И. Николин. — Киев: Наукова думка, 1984. — 240 с.

[3] Белокопос Е.Д. Теория мартенсивных переходов в поле внешних напряжений на основе аксиальной модели Изинга. Приложение к системе Cu-Al-Ni [Текст]; препринт ИМФ 15.88 / Е.Д. Белокопос А.Ю. Гаевский. — Киев, 1988. — 30 с.

Новые эластичные материалы на основе синдиотактического 1,2-полибутадиена с необычными физико-механическими свойствами

Хамидуллин Айдар Раифович

Башкирский государственный университет

Чувывров Александр Николаевич, д.ф.-м.н.

aidar_kh_r@mail.ru

В данной работе сообщается о возникновении новых термоэластомеров на основе синдиотактического 1,2-полибутадиена (1,2-СПБ) новой структуры, интенсивно рассеивающей свет, накопление которой сопровождается потерей прозрачности образца, при простой деформации растяжения плёнок. Её особенностью является квадратичный закон деформации, когда напряжение σ пропорционально квадрату относительной деформации $\sigma \sim \varepsilon^2$.

Полимер синдиотактический 1,2-полибутадиен (СПБ) относится к классу частично кристаллических эластомеров, имеет стереорегулярное строение с расположением заместителей по обе стороны молекулярной цепи. В промышленности СПБ получают с некоторым содержанием звеньев 1,4-присоединения, благодаря чему он проявляет свойства термоэластопласта [2-3]. В настоящей работе сообщается об изучении структуры и свойств возникающей в плёнке СПБ при одноосной деформации фазы, интенсивно рассеивающей свет, в результате чего прозрачная плёнка становится молочно-мутной.

В качестве объекта исследований использовали СПБ марки RB830 (JSR Corp., Япония). Среднечисловая молекулярная масса полимера $M_n=1.2 \cdot 10^5$, содержание 1,2-звеньев 93%, степень синдиотактичности 80-90%, степень кристалличности 30%. Образцы готовили в виде стандартных двусторонних лопаток с рабочей частью 2.5×10 мм и толщиной $1.0 \pm 0,2$ мм (ГОСТ 270-75). Одноосное растяжение лопаток проводили на испытательной машине «ЗМ-40» (Германия) с постоянной скоростью 6.7×10^{-3} м/с при температуре $20 \pm 2^\circ$ С. Рентгеноструктурный анализ образцов осуществляли на дифрактометре Bruker D8 Advance (Германия). Размеры кристаллитов определяли по формуле Шеррера [4]. Строение и морфологию образцов изучали с использованием поляризационно-оптического микроскопа «AxioLab Pol» (Карл Цейсс, Германия).

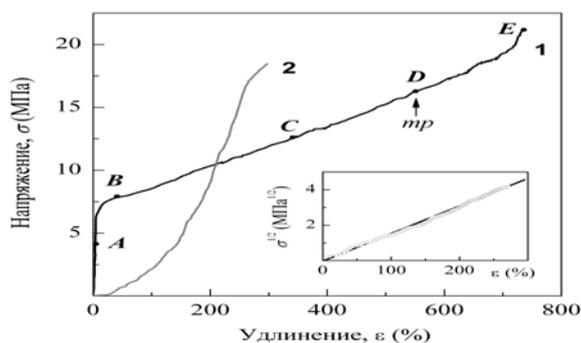


рис. 1. Типичная деформационная кривая исходного образца RB830 (кривая 1) и в состоянии «milk phase» (кривая 2). На вставке: кривая 2 в координатах $\sigma^{1/2}$ - ε .

Деформационная кривая исходного образца RB830 в виде зависимости напряжения от удлинения (σ - ε) является типичной для этого полимера [5]: предел текучести составляет ~ 8 МПа, предел прочности 21 МПа

(рис. 1, кривая 1). В области ОА происходит упругая деформация, в области точки В заметен небольшой скачок нагрузки, свидетельствующий о начале развития вынужденно-эластической деформации. Шейка не образуется, а наблюдается постепенное уменьшение поперечного сечения образца по всей длине. Деформация на участке DE обусловлена вынужденно-эластической, упругой деформацией и деформацией течения. В точке Е происходит разрушение образца. В зоне точки D, соответствующей деформации 500-600%, образец начинает терять прозрачность и окрашивается в молочно-мутный цвет, что соответствует формированию новой структуры, названной «milk phase» (mp) (рис. 2а).

Важным является то, что данный структурный переход не оказывает какого-либо влияния на режим дальнейшей деформации, а образующаяся структура и цвет образца сохраняются при сбросе напряжения. Молочная окраска образца, находящегося в mp состоянии, исчезает и он вновь становится прозрачным, если его отжечь, например, при температуре размягчения (60-80 °С) или приложить к образцу напряжение ~ 12 МПа.

Деформационная кривая образца в состоянии mp является также характерной для упорядоченных полимеров (рис. 1, кривая 2). Интересно отметить, что в координатах $\sigma^{1/2}$ - ϵ она описывается прямой линией (рис. 1, на вставке). Таким образом, σ растет незначительно при относительно малых деформациях, резко возрастает при увеличении степени деформации. При снятии напряжения возникшие деформации сбрасываются без отсутствия крэпа и образец полностью восстанавливает свою форму, что указывает на отсутствие течения макромолекул и характеризует mp как достаточно устойчивую к действию нагрузки.

Поляризационно-оптические исследования лопаток RB830 в mp состоянии отражают типичный характер погасания при повороте образца в скрещенных поляризаторах: погасание происходит в параллельном и перпендикулярном положении относительно направления растяжения, а полное просветление – в диагональном положении под углом 45°. Это свидетельствует о том, что цепи макромолекул RB830 при деформации ведут себя обычным образом и ориентируются вдоль направления растяжения.



рис. 2. Образование «milk phase»: микрофотографии лопаток на различных этапах деформации (а) и изображение поверхности лопаток в состоянии «milk phase», зарегистрированное с помощью атомного силового микроскопа (б).

Рассмотрим превращение структуры RB830 при деформации на основе рентгеноструктурных исследований. Типичная рентгенограмма исходного СПБ с указанием индексов основных брегговских рефлексов приведена на рис. 3, кривая 1. Из неё следует, что степень кристалличности полимера в исходных лопатках составляет около 22%. Кристаллиты образованы цепями плоской зигзагообразной формы с периодом идентичности $c=0.51$ нм по оси волокна. Цепи макромолекул упакованы в орторомбическую ячейку с параметрами: $a=1.1$ нм и $b=0.662$ нм, что хорошо согласуется с известными данными [6]. Средние размеры кристаллитов в плоскости ab определены из ширины дифракционных рефлексов (010) и (210) и составляют 28×28 нм. Размеры кристаллитов вдоль направления c оценены из ширины четвертого интенсивного рефлекса (111)/(201) и имеют немного меньшую величину порядка 15-17 нм. В момент формирования mp (точка D, рис. 1) происходит заметное уменьшение размеров кристаллитов в плоскости ab до $\approx 17 \times 17$ нм. Размер кристаллитов вдоль оси c , по-видимому, уменьшается до величин порядка нескольких параметров элементарной ячейки, и поэтому рефлексы, отвечающие периодичности вдоль направления c , прежде всего (111)/(201), размываются и не регистрируются на рентгенограмме (рис. 3, кривая 2). Это может быть связано как с разрушением уже имеющихся кристаллитов, так и с появлением новых из-за ориентации макромолекул при деформации. Перераспределения интенсивности вдоль оставшихся рефлексов типа $(hk0)$ не наблюдается, что свидетельствует об изотропной ориентации кристаллитов в плоскости, нормальной оси макромолекул. Общая степень кристалличности СПБ при этом увеличивается в 1.5 раза до ~ 33%.

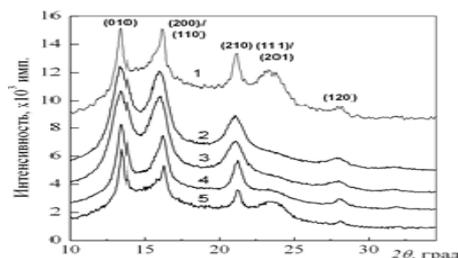


рис. 3. Рентгеновские дифрактограммы RB830: 1 – исходная лопатка, 2 – лопатка после деформации ~600%, 3 – образец 2 после дополнительного приложения гидростатического давления в 12-13 МПа, 4 – образец 2 после отжига при $T=80^\circ\text{C}$, 5 – образец 2 после отжига при $T=140^\circ\text{C}$

Если к плёнке RB830, находящейся в состоянии *mp*, приложить поперечное напряжение в 12-13 МПа, то она вновь становится прозрачной. При этом рентгенограмма полимера не меняется (рис. 3, кривая 3).

Отжиг *mp* плёнки при температуре размягчения (~80°C) приводит к частичному восстановлению исходной кристаллической структуры (рис. 3, кривая 4), её прежних размеров и прозрачности; увеличение температуры отжига выше температуры плавления (~140°C) ведет к практически полному восстановлению исходного состояния (рис. 3, кривая 5).

На основании полученных результатов нами предложена модель [1], объясняющая потерю прозрачности плёнок RB830 формированием в полимере паракристаллической структуры в виде кластеров, где между ориентированными в одном направлении пластинами располагаются вытянутые, хорошо упорядоченные макромолекулы. С увеличением степени деформации происходит увеличение размеров кластеров до сотни нм и они становятся сравнимыми с длиной волны видимого света, что может переводить среду из прозрачной в опалесцирующую (рис. 2а). Но реализуется другой сценарий, связанный с формированием пластинчатой нанопазы, подтверждённый методами атомной силовой микроскопии (рис.2б) В этой ситуации свет рассеивается на дефектах (дисциплинациях) структуры.

Список публикаций:

- [1]. Чувывров А.Н., Кинзябулатов Р.Р., Лебедев Ю.А. Доклады РАН, 2011, том 437, № 5, с. 659–662
- [2]. Natta G., Corradini P. // *J. Polymer Sci.* 1956. V. 20. P. 251-266.
- [3]. Kimura S., Shiraishi N., Yanagisawa S., Abe M. // *Polym.-Plast. Technol. Eng.* 1975. V. 5. № 1. P. 83-105.
- [4]. Кутайгородский А.И. Рентгеноструктурный анализ мелкокристаллических и аморфных тел. М.-Л.: ГИТТЛ, 1952. 588с.
- [4]. Anil K.B., Howard L.S. *Handbook of elastomers.* New York: Marcel Dekker, Inc., 2000. 944 p.
- [5]. Chen Y., Yang D., Hu Y., Zhang X. // *Cryst. Growth and Design.* 2004. V. 4. № 1. P. 117-121.

Магнитные свойства твердых растворов $\text{Ho}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$

Харьков Антон Михайлович

Сибирский государственный аэрокосмический университет им. М.Ф. Решетнева

Аплеснин Сергей Степанович, д.ф.-м.н.

khark.anton@mail.ru

Поиск и исследование новых материалов, обладающих эффектом колоссального магнитосопротивления и термоэдс, стимулируется активно развивающейся спинтроники и альтернативными видами источников энергии. Магнитные полупроводники MnS и HoS имеют один тип кристаллической структуры NaCl и разные магнитные структуры. Так MnS является коллинеарным антиферромагнетиком с ферромагнитным упорядочением спинов в плоскости $[111]$ и антиферромагнитным расположением плоскостей. Температурное поведение магнитных характеристик HoS описывается в модели скошенного антиферромагнетика с осциллирующими обменными взаимодействиями от расстояния. Магнитные свойства этих соединений обусловлены электронной структурой [1].

Цель работы состояла в исследовании влияния электрон-дырочного допирования t_{2g} и e_g хаббардовских зон на магнитные свойства, смену типа магнитного порядка, электронного фазового перехода металл-диэлектрик.

Согласно базе данных, для практических исследований структуры соединений, исследуемые нами образцы, твердых растворов $\text{Ho}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$, являются однофазными, то есть имеют кубическую структуру, с параметрами элементарной ячейки, зависящей от концентрации ионов гольмия. Исходя из результатов, полученных в работе, размер элементарной ячейки в твердом растворе $\text{Ho}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ линейно зависит от концентрации. Посторонние рефлексы, отличные от ГЦК структуры не наблюдаются [2].

Магнитные свойства исследованы на установке Quantum Design PPMS XL в интервале температур $4 \text{ K} < T < 300 \text{ K}$ со скоростью нагрева образцов 4 град/мин . Была измерена зависимость магнитного момента от температуры в поле $H=500 \text{ Oe}$ для нескольких составов. С ростом концентрации температурный интервал, где магнитная восприимчивость описывается законом Кюри-Вейсса, увеличивается и зависимость $1/\chi(T)$ хорошо описывается линейной функцией $1/\chi(T)=(T+\theta)/C$ с отрицательной парамагнитной температурой Кюри θ для всех составов. Небольшие концентрации замещения марганца гольмием вызывают резкое уменьшение $\theta(x)/\theta(x=0)$, практически в три раза для $x=0.05$. Производная восприимчивости $d\chi(T)/dT$ для этого состава обнаруживает слабый максимум при $T=103 \text{ K}$, который можно связать с образованием дальнего магнитного порядка. Если через две точки на графике $TN(x)$ провести прямую линию, то асимптотика даст критическую концентрацию $x\sim 0.1$, при которой исчезает дальний антиферромагнитный порядок 2-го типа.

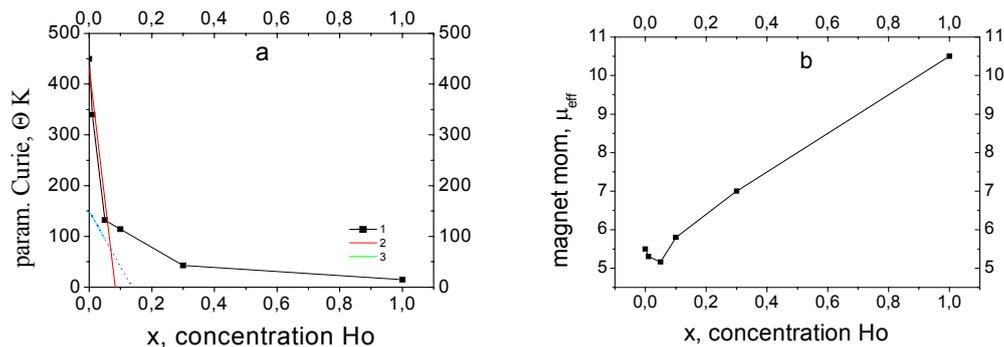


рис. 1. (а) Зависимость парамагнитной температуры Кюри Θ от концентрации x ; (б) Зависимость эффективного момента μ_{eff} от концентрации x

Эффективный магнитный момент, вычисленный как $\mu_{\text{eff}} = (3kC/N\mu B^2)^{1/2}$, изображен на рис.1б. Для исходных соединений MnS $\mu_{\text{eff}} = 5.5\mu\text{B}$, и для HoS $\mu_{\text{eff}} = 10.8\mu\text{B}$. С ростом концентрации гольмия эффективный магнитный момент линейно растет, кроме области малых концентраций $x \leq 0.05$. В этой области концентраций преобладают изолированные ионы гольмия, электроны которых в 5d- оболочке гибридизируются с 3d-электронами марганца и являются донорами электронов в сульфиде марганца. В результате изменение концентрации электронов в t2g оболочке марганца снимает орбитальное вырождение и орбитальный момент дает вклад в полный магнитный момент. В 5d- оболочке гольмия заполнено только одно состояние и в результате донорно-акцепторной связи Mn-Ho образуется сильное ферромагнитное взаимодействие, величину которого можно оценить в приближении молекулярного поля из парамагнитной температуры Кюри. Обменное поле в неупорядоченном твердом растворе MnHoS состоит из трех частей $H_E = W_1 z_1 J_{\text{MnMn}} + W_2 z_2 J_{\text{MnHo}} + W_3 z_3 J_{\text{HoHo}}$, где W_i – концентрация обменных взаимодействий между ионами Mn-Mn, Mn-Ho и Ho-Ho, z – число ближайших соседей.

В сульфиде марганца MnS обменное взаимодействие во 2-ой координационной сфере (K) в два раза превышает величину обмена между ближайшими соседями J_{MnMn} и $H_{\text{EMn}} = S(12J + 6K) = 24SJ$, $K/J = 2$ поэтому используем эффективный обмен $J_{\text{MnMn}} = 2J$, $z = 12$. Эффективный обмен для HoS, определенный из парамагнитной температуры Кюри $\Theta = 15$ К, магнитный момент $J = 8$ составляет $J_{\text{HoHo}} = J(J+1)/S(S+1)K_{\text{HoHo}} = 0.2$ К. Выражение для парамагнитной температуры Кюри в твердом растворе имеет вид: $\Theta = 2/3S(S+1)[J_{\text{MnMn}}(z - z_x - 0.5z(z-1)x^2) + J_{\text{MnHo}}(z_1 x + (2z_1 x - 1)x^2) + J_{\text{HoHo}} z x^2]$ в области концентраций $x < 0.05$. Подгонка данной функции к экспериментальным данным по параметру J_{MnHo} дана на рис.1а и хорошо согласуется с экспериментальными результатами для $J_{\text{MnHo}} = 44$ К, $z_1 = 12 + 6 = 18$ с радиусом действия обменного взаимодействия в 1-ой и 2-ой координационных сферах. Согласно теоретическим расчетам фазовой диаграммы основного состояния неупорядоченного магнетика на ГЦК решетке в области концентраций $0.1 < x < 0.15$ для параметров $J_{\text{MnHo}}/J_{\text{MnMn}} \sim 7$ дальний магнитный порядок исчезает и образуется состояние спинового стекла.

В состоянии спинового стекла время, в течение которого устанавливается термодинамическое равновесие, зависит от температуры и магнитные характеристики зависят от частоты измерений. Магнитная проницаемость ниже $T = 30$ К зависит от частоты. Так относительное изменение $\text{Re}(\mu(\omega = 10 \text{ kHz}) - \mu(\omega = 100 \text{ Hz})) / \text{Re}(\mu(\omega = 100 \text{ Hz}))$ увеличивается с ростом концентрации гольмия и $\text{Re}(\mu(T))$ обнаруживает максимум при $T = 5$ К, который отсутствует в HoS. Мнимая часть диэлектрической проницаемости практически не зависит от температуры и имеет величину $\text{Im}(\mu(T)) \sim 10^{-7}$ для концентраций $x \leq 0.1$ и $\text{Im}(\mu(T))$ качественно отличается в области низких температур для состава с $x = 0.3$. Величина поглощаемой магнитной энергии растет при $T < 100$ К и проходит через максимум при $T = 39$ К для $\omega = 1$ kHz, при $T = 44$ К для $\omega = 10$ kHz. Рост температуры максимума мнимой части магнитной проницаемости с увеличением частоты также связано с образованием метастабильных состояний и является характерным признаком спин-стекольного поведения. Возможно, механизм релаксации спинов связан с обменным взаимодействием локализованных и делокализованных электронов. Так при этой концентрации сопротивление $\rho_{\text{HoMn}1-x\text{S}}$ уменьшается на несколько порядков и энергия из спиновой системы переходит в кинетическую энергию носителей тока [3].

Другим фактором, подтверждающим ферромагнитный тип взаимодействия между спинами ионов марганца и гольмия, является не аддитивный характер температурного поведения магнитной восприимчивости. Температурное поведение восприимчивости представляется, как сумма восприимчивостей сульфида марганца и сульфида гольмия с соответствующими весами: $\chi_{\text{сум}} = (1-x)\chi_{\text{Mn}} + x\chi_{\text{Ho}}$. По сравнению с экспериментальными данными, соответствующее значение $\chi_{\text{сум}}$ на 25% – 50% меньше. Это указывает, что дополнительный вклад в восприимчивость обусловлен слабым ферромагнитным моментом, образованным на границе раздела ионов

гольмия в MnS. При исчезновении корреляции между магнитными моментами гольмия при $T > 20$ К магнитный момент на межфазной границе ориентируется по магнитному полю, что приводит к росту $\Delta\chi = \chi_{\text{exp}} - \chi_{\text{com}}$.

Этот механизм также объясняет нелинейное поведение магнитного момента от внешнего магнитного поля. Зависимость $M(H)$ имеет точку перегиба и гистерезис намагниченности в интервале полей $H = 4.5 - 5.5$ Тл для концентраций $x \leq 0.1$ при температуре $T = 5$ К. При нагревании $T \geq 25$ К гистерезис исчезает и кривая намагничивания $M(H)$ становится линейной. Для состава с $x = 0.3$ гистерезис сохраняется вплоть до нулевых полей и в отсутствие поля образец имеет спонтанный магнитный момент $\sigma_0 = 0.5$ emu/g или $\sigma_0 = 0.01 \mu\text{B}$. Таким образом, в твердых растворах $\text{Ho}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ в области концентраций $0.1 < x < 0.15$ найдено резкое уменьшение парамагнитной температуры Кюри Θ , магнитного момента, что связано с наличием сильного ферромагнитного взаимодействия между ионами Mn и Ho. Возможно, что в области этих же концентраций исчезает дальний ферромагнитный порядок. Для концентрации $x = 0.3$ при охлаждении в магнитном поле, обнаружен слабый магнитный момент.

Список публикаций:

[1] Ehrenstein W., Mazur N., and Scott J. *Nature* 442, 759 (2006).

[2] Aplesnin S.S., Bandurina O. N., Romanova O. B. and et. al. *J. Phys.: Condens. Matter* 22, 226 (2010).

[3] Aplesnin S.S., Petrakovskii G.A., Ryabinkina L.I. and et. al. *Sol. St. Comm.* 129, 197 (2004).

Исследование гетероструктур AlGa_xN/GaN методами рентгенодифракционного анализа

Хасанов Вадим Миратович

Пермяков Вадим Олегович

Челябинский государственный университет

Беленков Евгений Анатольевич, д.ф.-м.н.

vadim_khasanov@mail.ru

В последнее время неуклонно растет интерес к гетероструктурам AlGa_xN/GaN, на основе которых созданы полевые транзисторы, которые по совокупности параметров являются наиболее подходящими для создания СВЧ-приборов. Основная особенность нитридных гетероструктур – образование на гетерогранице AlGa_xN и GaN, за счет пьезолегирувания, двумерного электронного газа (ДЭГ) со слоевой концентрацией электронов порядка 10^{13} см^{-2} . При этом подвижность электронов ДЭГ во многом зависит от степени совершенства гетероструктур и может при 300К достичь значений от 1000 до 2000 $\text{см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$. Поэтому необходимы детальные исследования взаимосвязи степени совершенства гетероструктур с их свойствами. В данной работе методами высокоразрешающей рентгеновской дифракции были исследованы образцы GaN и Al_xGa_{1-x}N, выращенные на сапфировых подложках методом МОС-гидридной эпитаксии.

Исследования проводились с помощью рентгеновского дифрактометра высокого разрешения Bede D1 System в двухосевой схеме. Распределение интенсивности измерялось в окрестности узлов обратной решетки (0002) (симметричная геометрия) и (11 $\bar{2}$ 4) (асимметричная геометрия). Для каждого рефлекса были построены кривые качания в двух направлениях сечения узлов обратной решетки – перпендикулярно вектору дифракции (ω -сканирование) и параллельно (ω -2 θ -сканирование).

В результате исследования гетероструктур GaN/AlGa_xN установлено, что:

- 1) По построенной карте обратного пространства в окрестностях рефлекса (0002) видно, что данная структура обладает характерной мозаичностью и находится в напряженном состоянии. В структуре присутствуют винтовые дислокации плотностью порядка $1 \times 10^8 \text{ см}^{-2}$. Но, несмотря на это наблюдается когерентность слоев выращенной структуры;
- 2) Анализ карт рассеяния обратного пространства рефлекса (11 $\bar{2}$ 4) показал наличие также краевых дислокаций плотностью порядка $5 \times 10^9 \text{ см}^{-2}$. При этом пик от AlGa_xN немного смещен относительно пика от нитрида галлия в область больших углов, что свидетельствует о наличии небольшой разориентации в гетероструктуре.

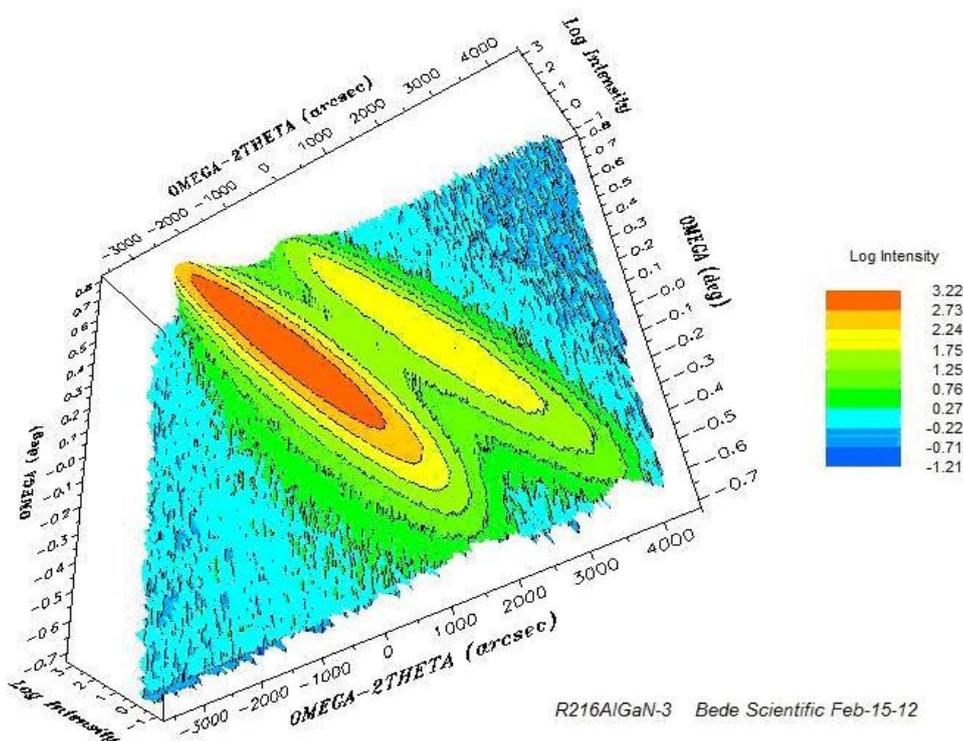


рис.1. Карта рассеяния обратного пространства рефлекса $(11\bar{2}4)$ структуры AlGaIn/GaN.

Анализ влияния скорости охлаждения и температуры на физические параметры нанокластеров Cu синтезированных из газовой фазы

Чепкасов Илья Васильевич

Гафнер Юрий Яковлевич, Гафнер Светлана Леонидовна

Хакасский государственный университет им.Н.Ф. Катанова

Гафнер Юрий Яковлевич, д.ф.-м.н.

ilya_chepkasov@mail.ru

Для исследования процесса конденсации нанокластеров меди из газовой фазы была использована компьютерная модель, основанная на методе молекулярной динамики. Для вычисления сил межатомного взаимодействия применялся модифицированный потенциал сильной связи [1]. Начальной точкой процесса конденсации была конфигурация, содержащая 85000 атомов меди равномерно распределенных в пространстве объемом $V = 42600 \text{ nm}^3$ с использованием периодических граничных условий. Для удаления этой избыточной энергии из системы использовался термостат Андерсена [2]. В данном стохастическом методе атомы испытывают случайные столкновения с некими виртуальными частицами. Эффект этих столкновений проявляется в том, что скорость реальных частиц понижается случайным образом по сравнению с распределением Максвелла-Больцмана при предыдущей температуре. В нашем случае такие столкновения имитируют взаимодействие с атомами охлаждающего инертного газа, применяемого в реальных экспериментах по синтезу нанокластеров из газовой среды. Используя данный метод при частоте столкновений частиц $U=0.05 \text{ ps}^{-1}$, $U=0.025 \text{ ps}^{-1}$ и $U=0.005 \text{ ps}^{-1}$, мы охлаждали исследуемые системы до двух конечных температур 77 и 373 К.

Основной задачей данной работы являлась исследование методом компьютерной имитации процессов возникновения наночастиц Cu из газовой фазы относительно размера синтезированных частиц, формирующиеся при этом структуры, а также влияние ряда физических факторов на эти параметры. Для изучения влияния скорости охлаждения и конечной температуры на синтезированные частицы и их структуру было смоделировано охлаждения системы с тремя различными скоростями и двумя конечными температурами. Выбор конечных температур вызвано тем, что на промышленно - экспериментальных установках по получению нанопорошков металлов используют в качестве охлаждающей жидкости как жидкий азот, с температурой кипения 77К, так и обычную воду с температурой кипения 373К. И очень важно, с точки зрения эффективности

промышленных производств, понимать, как различные экспериментальные методики влияют на размер и структуру получаемых наночастиц.

Скорость охлаждения (U, пс-1)	Температура (Т, К)	Число кластеров	Структура				Форма	
			ГЦК (ГПУ)	Ih	Dh	Аморфная	Цепочечная	Сферичная
0.05	77	46	22.02%	45.83%	20.87%	11.28%	76.08%	23.92%
0.025	77	35	22.51%	41.93%	30.02%	5.54%	74.28%	25.72%
0.005	77	17	23.59%	26.82%	49.59%	0%	58.83%	41.17%
0.05	373	19	22.57%	31.38%	46.05%	0%	89.47%	10.53%
0.025	373	13	29.43%	30.07%	40.5%	0%	84.61%	15.39%
0.005	373	6	38.33%	26.67%	35%	0%	83.34%	16.66%

В таблице представлены результаты анализа структур и форм кластеров, сконденсированных из газовой фазы при различных конечных температурах и скоростях охлаждения. В первую очередь из представленных результатов, очевидно, что скорость охлаждения влияет на количество синтезированных частиц. При уменьшении скорости охлаждения в 10 раз количество получаемых частиц уменьшается на 2.7 раза при конечной температуре 77К и в 3.1 раза при 373К. Такая закономерность объясняется уменьшением вероятности агломерации частиц при более скоростном охлаждении системы.

Так же отчетливо заметны изменения структур частиц в зависимости от режима охлаждения. При понижении скорости охлаждения наблюдается переход кластеров в область плотноупакованных структур. Такой результат закономерен вне зависимости от конечных температур охлаждения. Однако при детальном сравнении структур выявлено, что при высокой конечной температуре процентное соотношение декаэдров с уменьшением скорости охлаждения падает, в отличие от показателей для этой структуры при 77К. Это связано с тем, что декаэдрическая структура является промежуточной между икосаэдрической и плотноупакованной (ГЦК, ГПУ) и в условиях, когда в системе достаточно кинетической энергии, частицы используют её для перестройки своей внутренней структуры. Из таблицы можно сделать вывод, что наиболее благоприятные условия для образования кластеров с плотноупакованной ГЦК, ГПУ структурой, возникают при установившейся в системе скорости охлаждения равной $U=0.005$ пс-1 и конечной температуре $T=373$ К. Для синтеза наночастиц с икосаэдрической структурой наиболее благоприятные условия создаются при скорости охлаждения $U=0.05$ пс-1 и конечной температуре $T=77$ К. При таких параметрах системы примерно половина получаемых частиц имеют икосаэдрическую структуру и сферичную форму. Размер таких частиц не превышает 1000 атомов.

Детально рассмотрим соотношение структур и форм нанокластеров в системах с различными конечными температурами. При сравнительном анализе структур, получаемых при 77 и 373К, отчетливо заметно преобладание плотноупакованных структур (ГЦК, ГПУ, декаэдры) в системе с конечной температурой 373К. Так же при этих параметрах охлаждения отсутствуют частицы с аморфной структурой. В первую очередь это связано с тем, что у кластеров достаточно энергии, для того чтобы в условиях свободного движения в заданных размерах моделируемого пространства оптимизировать свою внутреннюю структуру за относительно небольшой промежуток времени ~ 20 нс. Формы частиц получаемых при таких условиях синтеза представляют собой некие конгломераты, состоящие из большого количества мелких слипшихся частиц. Такие частицы, с большой площадью поверхности, являются оптимальными для использования в каталитических реакциях, где определяющим фактором эффективности, является площадь соприкосновения с другими химическими элементами. Получение же сферичных кластеров наиболее эффективно можно проводить в системе с температурой охлаждающей жидкости порядка 77К. В зависимости от скорости охлаждения доля сферичных кластеров может достигать трети от всего количества синтезированных частиц.

В данной работе методом молекулярной динамики было смоделировано охлаждение системы с тремя различными скоростями и двумя конечными температурами. И было показано что структура и форма получаемых частиц зависит в равной степени как от скорости, с которой охлаждаются систему, так и от конечной температуры. Так, если необходимо получать плотноупакованные частицы большего размера со значительной площадью поверхности, то в экспериментально-промышленных установках необходимо использовать водяное охлаждение. Это позволит достаточно эффективно отводить энергию из системы, не внося значительный вклад в механизмы столкновения и объединения кластеров, что позволит им формировать большие конгломераты. В случае технической необходимости производства более мелкодисперсных частиц в качестве охлаждающего вещества более обоснованным будет использование жидкого азота.

Список публикаций:

[1] Cleri F. and Rosato V. //Phys. Rev.1993. V. 48. P. 22.

[2] Andersen H.C. //J. Phys. Chem.1980. V. 72. P. 2384-2392.

Зависимость скорости формирования ферромагнитной фазы от параметров модели

Шабунина Евгения Валерьевна

Спирин Дмитрий Владимирович

Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова

Удодов Владимир Николаевич, д.ф.-м.н.

galichinaev@mail.ru

В настоящее время уникальные физические свойства наночастиц, возникающие за счёт поверхностных или квантово-размерных эффектов, являются объектом интенсивных исследований. На магнитные свойства вещества значительное влияние оказывают внешние условия – температура, давление, локальное окружение частицы, среда в которой она находится. Меняя размеры, форму, состав, строение наночастиц можно в определенных пределах управлять магнитными характеристиками материалов на их основе [1,2].

В данной работе используется модифицированная модель Изинга, учитывающая взаимодействие во второй координационной сфере. Для уменьшения числа изменяемых энергетических параметров рассматривается гамильтониан, приведенный к энергии взаимодействия в первой координационной сфере [3].

$$\frac{H}{J_1} = -\sum_{i=1}^{N-1} S_i S_{i+1} - J_2 \sum_{i=1}^{N-2} S_i S_{i+2} - h \sum_{i=1}^N S_i \quad (1)$$

где J_2 – относительная энергия обменного взаимодействия во второй координационной сфере, h – относительная напряженность внешнего магнитного поля, S_i – проекция вектора спина на выбранную ось, N – количество атомов в системе, i – номер узла.

Исследовано влияние температуры на время перехода в ферромагнитную фазу (время релаксации) при различном размере системы с одним примесным атомом. При низких температурах τ практически не зависит от T , на границе этой области наблюдается максимум, но при этом присутствие даже одного примесного атома значительно уменьшает время релаксации. В присутствии внешнего магнитного поля и стремлении приведенной температуры к нулю время релаксации устремляется в бесконечность, что соответствует теоретическим представлениям [4]. Неравновесные процессы, происходящие в магнетике, можно условно разделить на два типа: быстрые и медленные. Первый – «быстрый» – в котором формируется ферромагнитная фаза. При этом в проведенной серии опытов образуются как магнетики (магнитные домены), у которых магнитный момент сонаправлен с направлением внешнего магнитного поля, так и те, у которых магнитный момент направлен в противоположную сторону. Второй процесс «медленный» – на этом этапе происходит переориентация спинов доменов, попавших в метастабильное состояние. Для такого перехода система должна преодолеть значительный потенциальный барьер, что маловероятно с учетом низких температур, существующих в системе. Именно этот процесс приводит к резкому увеличению времени релаксации при уменьшении температуры, так как чем ниже температура, тем сложнее выйти из метастабильного состояния. Заметим, что в модели высота барьера не зависит от температуры.

Зависимость времени релаксации от энергии взаимодействия во второй координационной сфере является немонотонной (рис. 1, а), но в целом увеличению данной энергии способствует замедлению фазового перехода. При значительной энергии взаимодействия во второй координационной сфере в начале кривой зависимости $\tau(p)$ наблюдается максимум. Интересным является то, что при достаточном числе примесных немагнитных атомов в образце изменение параметра взаимодействия вторых соседей J_2 не влияет на время релаксации в пределах погрешности расчета (исследован интервал J_2 [-1;1]).

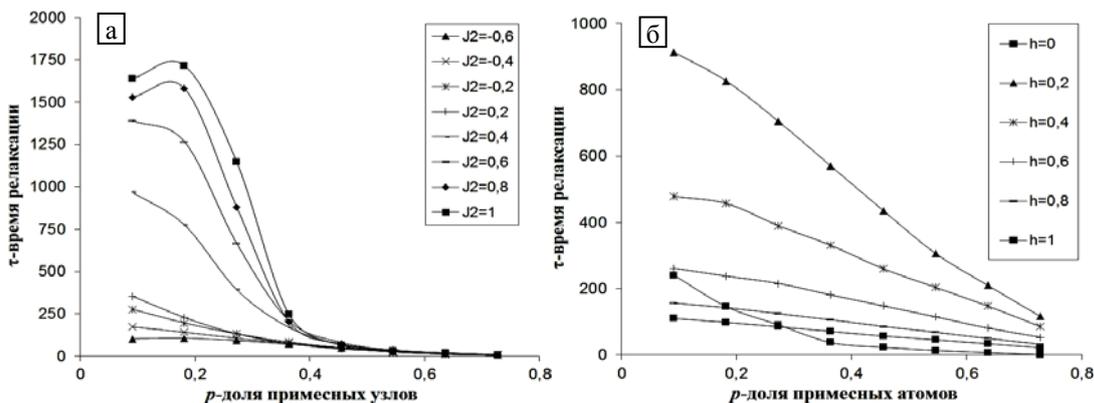


рис. 1. Зависимость времени релаксации от доли примесных узлов при различной энергии взаимодействия во второй координационной сфере (а) и напряженности внешнего магнитного поля (б)

В зависимости времени релаксации от напряженности внешнего магнитного поля наблюдаются максимумы. Увеличение числа примесных атомов приводит к смещению данных максимумов вправо и уменьшению времени релаксации, т. е. система быстрее приходит в равновесие.

Рост доли примесных атомов приводит к уменьшению времени релаксации вне зависимости от напряженности внешнего магнитного поля или его отсутствия (рис.1,б). При этом, когда доля примесных атомов велика (для данных параметров $p > 0,3$) время релаксации без поля меньше, чем при наличии сильного поля (исследовано до $h=1$). Таким образом, с помощью внешнего поля мы сможем управлять переходом в ферромагнитное состояние, замедляя или наоборот ускоряя этот процесс. Наведением слабого поля мы сможем добиться увеличения времени релаксации, так например в случае с параметрами $T=0,5$; $J_2=0$; $N=11$; $Na=1$ происходит замедление процесса перестроения фазы в 4 раза (значения напряженности внешнего магнитного поля для получения максимального значения времени релаксации берем из графиков $\tau(h)$). При увеличении доли немагнитных примесных атомов данным способом можно замедлить процесс формирования ферромагнитной фазы более чем в 10 раз. С другой стороны при малой концентрации ($p < 0,3$) примесей можно ускорить процесс образования ферромагнетика помещая его в сильное внешнее магнитное поле ($h \sim 1$). Так в поле с напряженностью $h=1$ для доли примесных узлов $p=0,1$ значение времени релаксации в 2 раза меньше чем без поля.

Рост температуры приводит к постепенному снижению зависимости времени релаксации от размеров системы. При увеличении длины цепочки степень зависимости времени релаксации от размеров системы также уменьшается.

Список публикаций:

- [1] Губин С.П. // *Росс. Хим. Журнал.* – 2000. – № 4. – С. 23-31.
- [2] Bucher J.P., Bloomfield L.A. // *Int. J. Mod. Phys. B.* – 1993. – V.4. – P. 1079.
- [3] Спирич Д.В., Удодов В.Н., Потекаев А.И., Голосов Н.С. // *Изв. вузов. Физика.* – 2005 – №4. – С.65-69.
- [4] Лившиц Е.М., Пятаевский Л.П. *Физическая кинетика.* – М.: Наука, 1979. – 528 с.

Влияние теплофизических свойств материала матрицы и включений на тепловой режим образцов облучаемых низкоэнергетическим сильноточным импульсным электронным пучком

Шепель Дарья Александровна

Институт сильноточной электроники СО РАН

Марков Алексей Борисович

DAShepel@lve.hcei.tsc.ru

Нержавеющая сталь 316L и никелид титана благодаря их физическим и химическим свойствам получили широкое применение в промышленности и, в частности, в области медицины [1]. Известно также, что модифицирование поверхности может в ряде случаев существенно улучшать служебные характеристики деталей, изготовленных из этих материалов. Низкоэнергетические сильноточные электронные пучки (НСЭП) признаны эффективным инструментом для обработки поверхности материалов. Однако у этого метода обработки могут проявляться негативные последствия, одним из которых является образование микрократеров на облучаемой поверхности материала, что в значительной степени ухудшает свойства поверхности [2]. Обнаружено, что возникновение микрократеров связано с присутствием в материале включений второй фазы. В частности, показано, что на поверхности образца из нержавеющей стали микрократеры появляются в местах расположения частиц сульфида марганца (MnS)[3]. Для образцов из никелида титана характерно появление микрократеров в местах расположения частиц интерметаллида NiTi₂.

На сегодняшний день механизм образования кратеров остается до конца невыясненным. Для прояснения этого вопроса, необходимо рассчитать температурный режим мишени в области расположения включений. В данной работе численно решается задача о характеристиках температурного поля, индуцированного в образцах двух видов: из нержавеющей стали 316L и NiTi, при облучении НСЭП. Полагалось также, что образцы являются неомогенными, а каждый из образцов содержит включения. Для стальных образцов – это включения MnS, а для никелида титана - NiTi₂. Подробное описание геометрии задачи и метода расчета изложено в работе [4].

Для корректного сравнения получаемых результатов были определены параметры НСЭП, при которых на поверхности образцов обоих типов реализуется режим начального плавления: для никелида титана плотность энергии электронного пучка составила 2 Дж/см², а для нержавеющей стали 316L – 3 Дж/см². При

этом длительность импульса составляла 4 мкс, а энергия электронов – 30 кэВ. Предполагалось, что плотность тока и энергия электронов в процессе облучения не меняются.

Путем математического моделирования при указанных выше параметрах НСЭП были получены распределения температуры к концу импульса вдоль облучаемой поверхности образца для обоих типов образцов. Максимальные значения перегрева, то есть разницы в значениях температур в центре и на периферии облучаемой поверхности, возникающие на поверхности для этих двух случаев, существенно различаются. При облучении образца из никелида титана, перегрев незначителен и составляет около 12 К, тогда как при облучении образца из нержавеющей стали 316L он на порядок выше и составляет 342 К. Столь существенное различие в максимальном значении перегрева объясняется различием теплофизических свойств материалов матрицы и включения для каждой системы. Из распределений температуры по глубине образцов получено, что в обоих случаях происходит прогрев материала вплоть до 15 микрон. Благодаря присутствию включения процесс плавления поверхности происходит неравномерно. В обоих случаях плавление начинается в материале матрицы на границе с включением. Затем, в силу различного соотношения теплофизических свойств материалов рассматриваемых систем, плавление протекает по-разному. В никелиде титана после плавления на границе с NiTi₂ начинается постепенное плавление включения по направлению от границ к ее центру. Затем, спустя 1 мкс, вся поверхности оказывается расплавленной. При плавлении нержавеющей стали 316L, вслед за расплавом на границе, примерно через 0,8 мкс, появляется расплав в центре включения. Далее, область расплава распространяется от центра включения к его границе. Через 0,2 мкс после начала плавления вся поверхности оказывается расплавленной. Максимальное значение толщины расплава зависит от координаты точки облучаемой поверхности. Это также связано с присутствием на поверхности включения. Максимальное значение толщины расплава реализуется в области расположения включения, а минимальное – на периферии. Для системы NiTi/NiTi₂ максимальное и минимальное значения толщины расплава различаются мало и составляют 1,2 мкм и 1,1 мкм, соответственно. Время существования расплава в области периферии составляет 0,5 мкс, а время жизни расплава в области расположения включения больше – почти 3 мкс. Для системы нержавеющей стали 316L/MnS получено, что периферия находится в полностью расплавленном состоянии около 1,2 мкс, расплав в области включения существует около 8 мкс. Максимальная и минимальная толщина расплава для данной системы составляют 1,8 и 1,1 мкм, соответственно.

На основании проведенных расчетов можно сделать вывод о том, что, во-первых, соотношение между теплофизическими свойствами материалов матрицы и включений оказывает существенное влияние на тепловой режим образца, во-вторых, величина перегрева для системы 316L/MnS существенно больше, чем для системы NiTi/NiTi₂. Последний результат согласуется с тем, что кратерообразование в нержавеющей стали протекает более интенсивно, чем в титановых сплавах.

Список публикаций:

- [1] H. Hermawan, D. Ramdan, JRP. Djuansjah, *Metals for Biomedical Applications*, in R. Fazel (ed.), *Biomedical Engineering: from Theory to Applications*, ISBN: 978-953-307-637-9, InTech Pub, Croatia, 2011, 411-430.
- [2] Markov A.B., Rotshtein V.P.//*Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*. 1997.v.132. p.79-86.
- [3] J. Zou, K. Zhang, C. Dong, Y. Qin, S. Hao, T. Grosdidier//*Appl.Phys.Lett*. 2006. V.86. P.041913.
- [4] Д.А. Шербань, А.Б. Марков//*Письма в ЖТФ*. 2011. Т.37. Вып.16. С.63.

Рентгенографические исследования композитов стеклоуглерода с кобальтом

Шербань Максим Сергеевич

Петрозаводский государственный университет

Логинов Дмитрий Владимирович к.ф.-м.н.

m.sherbanich@yandex.ru

Целью данной работы было исследование особенностей структуры композитов стеклоуглерода с металлами. Образец чистого стеклоуглерода представлял собой плоскопараллельную пластинку стеклографита, полученную из фенолформальдегидной смолы при температуре термохимической обработки 2000°C. Для приготовления образцов с добавками металлов использовали смесь трех веществ: фурфуроливого спирта (ФС), дибутилфталата (ДБФ) и полиэтилен-10-гликолевый эфир изооктилфенола (C₈H₁₇C₆H₄O[C₂H₄O]₁₀N). На первом этапе изготовления образцов, готовились двухкомпонентные растворы (80% ФС–20% ОП) и (80% ФС–20% ДБФ), смешиванием которых в необходимых количествах затем готовились трехкомпонентные растворы. Кобальт добавлялся в виде соли ацетата кобальта (110 г/л Со). Также добавлялась соляная кислота HCl (25%) для катализа реакции поликонденсации ФС. После добавления кислоты образцы подвергали интенсивному перемешиванию с целью усреднения состава во всем объеме образца. В результате через 5–10 минут они приобретали темно-коричневый с зеленоватым отливом цвет и быстро густели. После этого образцы выдерживались при комнатной температуре в течение 2–3 дней для завершения полимеризации. Также для

различных образцов варьировалось % соотношение ОП-ДБФ (образцы предоставлены Технологическим институтом г. Лаппенранта, Финляндия, Lashkul A.V.).

Образцы рентгенографировались на дифрактометре ДРОН-6 в геометрии на просвет. Рентгенографирование проводилось в интервале углов рассеяния $2 - 145^\circ$ с шагом 0.5° , время съемки в точке 20 с. Исследования велись на монохроматическом излучении $\text{MoK}\alpha$. Монохроматизация осуществлялась с помощью кристалла-монохроматора (пиrolитический графит), установленного в первичном пучке. В экспериментальные кривые, усредненные по 5 съемкам, вводились поправки на рассеяние воздухом, поляризацию и поглощение. Коэффициент перевода в электронные единицы на атом рассчитывался по методу Уоррена [1, 2]. Из нормированных кривых распределения интенсивности $I(s)$ рассчитывались s-взвешенные интерференционные функции $H(s)$, из которых, в свою очередь, рассчитывались функции парного взаимодействия атомов $D(r)$. Подробно методика расчета описана в [3].

На (рис. 1а) сравниваются кривые рассеяния $I(s)$ чистого стеклоглерода и двух образцов стеклоглерода, синтезированного с добавлением кобальта.

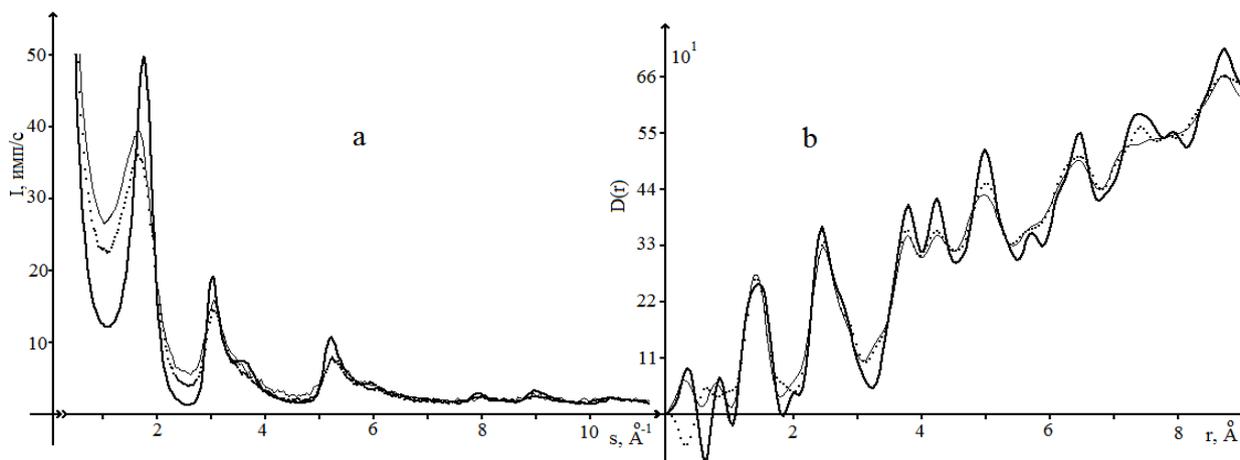


рис. 1. Кривые рассеяния $I(s)$ и парных функций $D(r)$: — чистый стеклоглерод (CV2000), - образец №33(1) образец №34(2).

Картины рассеяния рентгеновских лучей, представленные на (рис. 1а), характерны для аморфных образцов. Полученные кривые распределения $I(s)$ образцов 33, 34 качественно подобны распределению интенсивности рассеяния чистым стеклоглеродом.

Первый максимум на $I(s)$, характеризующий рассеяние пакетом графеновых сеток и имеющий на рентгенограмме графита индексы интерференции (002), на кривых рассеяния образцами, легированными кобальтом, смещен в сторону меньших углов рассеяния относительно соответствующей линии для чистого стеклоглерода и более размыт, чем у него.

Расчет парных функций с разным содержанием кобальта показал, что концентрация кобальта 0.0005 вес% (рис. 1б). Определение такого малого содержания кобальта возможно вследствие того, что рассеивающая способность кобальта в ~ 20 больше рассеивающей способности углерода.

Положения максимумов на кривых распределения парных функций $D(r)$ (рис. 1б) для всех исследованных образцов практически совпадают. Из кривых распределения $D(r)$ были рассчитаны координационные числа и радиусы координационных сфер. Установлено, что первые три радиуса координационных сфер для обоих легированных кобальтом образцов соответствуют значениям, рассчитанным из $D(r)$ для чистого стеклоглерода. Значения второго и третьего координационного числа \sim на 0.2 больше соответствующего значения для нелегированного стеклоглерода. Третье координационное число примерно в 6 раз выше, чем у чистого стеклоглерода и примерно в 2 раза выше, чем теоретически рассчитанное значение для гексагонального графита. такое увеличение указанных координационных чисел может свидетельствовать о наличии атомов кобальта в межсеточном пространстве и о сильном искажении углеродных сеток: гофрированные сетки.

Таким образом, анализ результатов показал, что образцы являются нанокомпозитами углерода с кобальтом. Методами компьютерного моделирования, аналогично [3], проводится построение атомных конфигураций, кривые распределения $H(s)$ которых соответствовали бы эксперименту.

Примечание: исследования проведены при поддержке Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 гг. № П801 от 24 мая 2010 г.

Список публикаций:

- [1] Алешина Л.А., Фофанов А.Д., Осауленко Р.Н., Луговская Л.А., Кристаллография, т. 50, № 3, с. 436 (2005).
- [2] Букалов С.С., Михалицын Л.А., Зубавичус Я.В., Лейтес Л.А., Новиков Ю.Н., Рос.хим.ж., Т1 №1 С. 83 (2006).
- [3] Логинов Д.В., Алешина Л.А., Фофанов А.Д., Ученые записки Петрозаводского государственного университета, №8(113), 99(2010).