## 2 - Физика конденсированного состояния вещества

Баишева Алия Хазинуровна, магистрант 1 года обучения
Уфа, Башкирский государственный университет, Физико-технический институт
**Электрофизические и тепловые свойства сплавов K(x)Cu(2-x)S**
Балапанов Малик Хамитович, д.ф.-м.н.
e-mail: *aliya-baisheva@yandex.ru* стр. 65

Болат-оол Анна Андрияновна, магистрант 1 года обучения
Томск, Национальный исследовательский Томский политехнический университет, инженерная школа ядерных технологий
**Исследование режимов спекания кальций фосфатных мишеней разного состава для ВЧ магнетронного напыления биопокрытий**
Шаркеев Юрий Петрович, д.ф.-м.н.
e-mail: *anna_bolat-ool@mail.ru* стр. 66

Бурдуковский Владимир Николаевич, 4 курс
Томск, Национальный исследовательский Томский государственный университет, физико-технический
**Исследование тонкой кристаллической структуры спеченных керамик $ZrO_2$ и $ZrO_2$-$ZrB_2$ после ударно-волнового компактирования**
Кульков Сергей Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: *vladimirburdukovsky@gmail.com* стр. 67

Вагапов Александр Шамильевич, 3 курс
Екатеринбург, Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, физико-технологический
**Влияние 10МэВ пучка электронов на оптические свойства прозрачной керамики $MgAl_2O_4$**
Зацепин Анатолий Фёдорович, к.т.н.
e-mail: *Alexander1705q@icloud.com* стр. 68

Габдрахманова Лилия Айратовна, доцент
Уфа, Башкирский государственный университет, физико-технический институт
**Влияние пластической деформации ковкой на мартенситное превращение в сплаве системы Ni-Mn-Ga**
e-mail: *la-gabdrahmanova@mail.ru* стр. 69

Гордиенко Кирилл Алексеевич, аспирант 1 года обучения
Кемерово, Кемеровский государственный университет, институт фундаментальных наук
ИК-спектр молекулярных кристаллов C7H16NO2(Cl) и C5H14NO(Cl)
Журавлев Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.
e-mail: *gordie-kirill@rambler.ru* стр. 70

Денисова Алена Николаевна, 4 курс
Барнаул, Алтайский государственный педагогический университет, институт физико-математического образования
**Исследование теплостойкости полимерных материалов с помощью вероятностно-статистических подходов**
Насонов Алексей Дмитриевич, к.ф.-м.н.
e-mail: *tnovichihina@mail.ru* стр. 72

Доможирова Александра Николаевна, аспирант 1 года обучения
Екатеринбург, Институт физики металлов УрО РАН
**Электронные свойства монокристалла $WTe_2$**
Марченков Вячеслав Викторович, д.ф.-м.н.
e-mail: *domozhirova@imp.uran.ru* стр. 74

Драганюк Оксана Николаевна, магистрант 1 года обучения
Красноярск, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, физики и астрономии
**Влияние локального окружения на магнитные свойства силицидов марганца**
Замкова Наталья Геннадьевна, д.ф.-м.н.
e-mail: *don-oks@mail.ru* стр. 75

Ерагер Ксения Романовна, магистрант 2 года обучения
Челябинск, Челябинский государственный университет, физический
**Гранулометрический состав хромсодержащих полититанатов калия**
Саунина Светлана Ивановна, к.ф.-м.н.
e-mail: *eragerk@rambler.ru* стр. 76

Жармухаметов Айнур Ринатович, аспирант 1 года обучения
Уфа, Башкирский государственный университет, физико-технический институт
**Моделирование магнитоэлектрических и поверхностных свойств в сверхрешетках и нанопленках мультиферроиков**
Шарафуллин Ильдус Фанисович, к.ф.-м.н.
e-mail: *aiderfarro@gmail.com* стр. 77

Замковская Анастасия Игоревна, магистрант 1 года обучения
Симферополь, Крымский федеральный университет им. В.И.Вернадского, Физико-технический институт
**Исследование размерно-напряженных эффектов в боратах ABO3 (A=In, Fe, Ga)**
Максимова Елена Михайловна, к.ф.-м.н.
e-mail: *trabem.z@gmail.com* стр. 78

Игнатова Кристина Игоревна, магистрант 2 года обучения
Екатеринбург, Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, институт естественных наук и математики
**Оценка фрактальной размерности сформированных структур серебра на поверхности стеклообразных ионных проводников системы AgGe1+xAs1-x(S+УНТ)3, содержащих одностенные углеродные нанотрубки**
Мельникова Нина Владимировна, к.ф.-м.н.
e-mail: *christinaignatova@gmail.com* стр. 80

Каптелинин Святослав Юрьевич, магистрант 2 года обучения
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
**Исследование локальной атомной структуры меди в процессе твердофазного синтеза CuMOR по данным спектроскопии EXAFS**
Срабионян Василий Валерьевич, к.ф.-м.н.
e-mail: *kaptelinin@sfedu.ru* стр. 81

Катков Всеволод Леонидович, с.н.с.
Дубна, Объединенный институт ядерных исследований, лаб. теоретической физики
**Моделирование электронных и транспортных свойства графена на основе метода сильной связи**
e-mail: *katkov@theor.jinr.ru* стр. 82

Кашина Раъно Рустамовна, магистрант 1 года обучения
Пермь, Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермская научно-производственная приборостроительная компания, физический
**Исследование эффективности генерации иттербиевого лазера от длины волокна**
Азанова Ирина Сергеевна, к.ф.-м.н.
e-mail: *ranoxan13@gmail.com* стр. 82

Костенко Валерия -, аспирант 1 года обучения
Томск, Национальный исследовательский Томский политехнический университет, ИШФВП
**Влияние ионного облучения на фазовую перестройку керамики $ZrO_2$-3Y2$O_3$**
Гынгазов Сергей Анатольевич, д.т.н.
e-mail: *kostenko.lerochka@mail.ru* стр. 86

Костенко Валерия, аспирант 1 года обучения
Томск, Национальный исследовательский Томский политехнический университет, ИШФВП
**Исследование модифицированной ионными пучками керамики $Al_2O_3$ методом сканирующей электронной микроскопии**
Гынгазов Сергей Анатольевич, д.т.н.
e-mail: *kostenko.lerochka@mail.ru* стр. 84

Куличкина Туяра Петровна, 4 курс
Якутск, Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова, физико-технический институт
**Моделирование движения частицы в наклонной плоскости под действием потока воды**
Яковлев Борис Васильевич, д.ф.-м.н.
e-mail: *Turaret_2017@mail.ru* стр. 87

Лебедева Ольга Сергеевна, ассистент
Волгоград, Волгоградский государственный университет, институт математики и информационных технологий
**Пьезорезистивные свойства дираковских материалов**
e-mail*: lebedeva_os@volsu.ru* стр. 89

Луговской Назар Викторович, инженер
Симферополь, Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт
**О переходных слоях в эпитаксиальных пленках ферритов-гранатов**
Бержанский Владимир Наумович, д.ф.-м.н.
e-mail: *lugovskoynv@cfuv.ru* стр. 90

Любутина Марианна Владимировна, вед. инженер
Москва, Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, отдел ядерных методов и магнитных структур
**Мультиферроидные свойства кристалла $GdFe_3(BO_3)_4$, индуцированные высоким давлением**
e-mail: *lyuanne@mail.ru* стр. 92

Максимов Глеб Сергеевич, 2 курс
Симферополь, Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт
**Структурное совершенство эпитаксиальных пленок**
Максимова Елена Михайловна, к.ф.-м.н.
e-mail: neondreamer00@gmail.com стр. 93

Милодан Ариолла Владимировна, аспирант 2 года обучения
Симферополь, Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт
**Синтез и исследование железофосфатов**
Сапига Алексей Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: *ariolla@mail.ru* стр. 94

Мкртчян Виктория Дмитриевна, магистрант 2 года обучения
Ставрополь, Северо-Кавказский федеральный университет, институт математики и естественных наук
**Исследование силы взаимодействия плоских проводников с током, помещенных в магнитную коллоидную наносистему**
Диканский Юрий Иванович, д.ф.-м.н.
e-mail: *vika_g96@mail.ru* стр. 95

Могиленец Юлия Александровна, аспирант 2 года обучения
Симферополь, Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт
**Магниторезонансные исследования тонкой эпитаксиальной пленки $FeBO_3$**
Селезнева Кира Андреевна; Стругацкий Марк Борисович, к.ф.-м.н.; д.ф.-м.н.
e-mail: *mogilenecya@cfuv.ru* стр. 97

Наухацкий Игорь Анатольевич, аспирант 2 года обучения
Симферополь, Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт
**Разработка температурной приставки для рентгеноструктурного исследования веществ при отрицательных температурах**
Максимова Елена Михайловна, к.ф.-м.н.
e-mail: *nauhatsky@cfuv.ru* стр. 98

Оборотова Любовь Александровна, 4 курс
Елец, Елецкий государственный университет им. И.А. Бунина, институт математики, естествознания и техники
**ТермоЭДС в биологических жидкостях**
Кузнецов Денис Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: *olubov97@yandex.ru* стр. 99

Отаев Амирджон Ахмаджонович, магистрант 2 года обучения
Екатеринбург, Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина, физический
**Фазовые переходы в дираковском 3D полуметалле $Cd_3As_2$ с содержанием наногранул MnAs при высоких давлениях**
Мельникова Нина Владимировна, к.ф.-м.н.
e-mail: *otaev-95@mail.ru* стр. 101

Паладян Юлия Александровна, аспирант
Донецк, Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, отдел теории динамических свойств сложных систем
**Особенности трансформации поляритонного спектра, вызванные структурными дефектами в цепочки микропор**
Румянцев Владимир Васильевич, д.ф.-м.н.
e-mail: *paladyan0108@yandex.ru* стр. 101

Перескоков Владислав Сергеевич, аспирант 3 года обучения
Симферополь, Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт
**Вихревые решетки поверхностных плазмон-поляритонов на границе раздела металл-диэлектрик**
Дзедолик Игорь Викторович, д.ф.-м.н.
e-mail: *pereskokow@gmail.com* стр. 103

Петров Илья Александрович, магистрант 1 года обучения
Чебоксары, Чувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова, прикладной математики, физики и информ. технологий
**Синтез пленочных структур оксид меди-sp1 углерод для создания газовых сенсоров**
Смирнов Александр Вячеславович
e-mail: *fizteh21@yandex.ru* стр. 104

Петрова Светлана Дмитриевна, магистрант 1 года обучения
Красноярск, Сибирский федеральный университет, ИИФиРЭ
**Кристаллохимические условия выращивания монокристаллов тригональных ферроборатов $SmFe_3(BO_3)_4$**
Гудим Ирина Анатольевна, к.ф.-м.н.
e-mail: *i02060517@yandex.ru* стр. 106

Пипкова Анна Сергеевна, магистрант 1 года обучения
Ярославль, Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова, физический
**Рентгенофазовый анализ пленок $In_2S_3$ после плазменной обработки**
Зимин Сергей Павлович, д.ф.-м.н.
e-mail: *anna_pipkova@mail.ru* стр. 107

Пономарев Владислав Валериевич, магистрант 1 года обучения
Якутск, Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова, физико-технический институт
**Влияние допирования на электронные свойства графеновых нанолент**
Шарин Егор Петрович, к.ф.-м.н.
e-mail: *pon_slav@mail.ru* стр. 109

Прилепский Дмитрий Юрьевич, магистрант 2 года обучения
Симферополь, Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт
**Магнитоупругие эффекты в тригональных слабых ферромагнетиках**
Стругацкий Марк Борисович, д.ф.-м.н.
e-mail: *rockaroller@mail.ru* стр. 109

Руденская Елизавета Александровна, 2 курс
Кемерово, Кемеровский государственный университет, технологический институт пищевой промышленности
**Механизм образования химической связи и электронные свойства молекулы L-лизина**
Оболонская Оксана Сергеевна, к.ф.-м.н.
e-mail: *lizaveta23071999@mail.ru* стр. 110

Рыбалка Алексей Евгеньевич, 6 курс
Донецк, Донецкий национальный университет, физико-технический
**Влияние дефектов структуры на дисперсионные характеристики поляритонной 2D решетки туннельно связанных микропор, содержащих квантовые точки**
Румянцев Владимир Васильевич, д.ф.-м.н.
e-mail: *rybalka96@inbox.ru* стр. 111

Семянникова Алена Александровна, аспирант 1 года обучения
Екатеринбург, Институт физики металлов УрО РАН
**Особенности магнитных и гальваномагнитных свойств сплавов Гейслера Co2YSi (Y=Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni)**
Марченков Вячеслав Викторович, д.ф.-м.н.
e-mail: *semiannikova@imp.uran.ru* стр. 113

Смагина Елизавета Александровна, 4 курс
Ижевск, Удмуртский государственный университет, ИМИТиФ
**Переохлаждение расплавов Fe – Co (до 20 ат.% Co)**
Камаева Лариса Вячеславовна, к.ф.-м.н.
e-mail: *elizaveta.smagina.97@mail.ru* стр. 114

Смирнова Анастасия Юрьевна, 6 курс
Симферополь, Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт
**Изучение импульсных откликов ЯМР в двухспиновых системах**
Сапига Алексей Владимирович, к.ф.-м.н.
e-mail: *a.smirnovasbox@gmail.com* стр. 116

Снегирёв Никита Игоревич, 6 курс
Симферополь, Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт
**Мёссбауэровские исследования структурных фазовых превращений в ферроборате $FeBO_3$ при высокотемпературном отжиге**
Стругацкий Марк Борисович, д.ф.-м.н.
e-mail: *niksnegir@yandex.ru* стр. 117

Солодухин Дмитрий Сергеевич, 2 курс
Новосибирск, Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, физический
**Исследование оптических свойств нанопленок углерода на стеклах. Метод магнетронно-распылительных систем**
Золкин Александр Степанович, к.ф.-м.н.
e-mail: *alkrommus@gmail.com* стр. 118

Томилина Ольга Андреевна, аспирант
Симферополь, Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, Физико-технический институт
**Влияние диэлектрического окружения на изменение резонансной частоты локализованных плазмонов**
Бержанский Владимир Наумович, д.ф.-м.н.
e-mail: *olga_tomilina@mail.ru* стр. 119

Угодчикова Анна Владимировна, магистрант 1 года обучения
Томск, Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий
**Формирование силикатных биопокрытий на поверхности сплава Mg0.8Ca**
Седельникова Мария Борисовна, д.т.н.
e-mail: *Ugodch99@gmail.com* стр. 121

Федосов Эрнест Энверович, магистрант 2 года обучения
Симферополь, Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт
**Магнитные и диэлектрические свойства композитов на основе углеродных нанотрубок**
Бержанский Владимир Наумович, д.ф.-м.н.
e-mail: *ernestfedosov@gmail.com* стр. 122

Филиппов Даниил Игоревич, аспирант
Кемерово, Кемеровский государственный университет, физический
**Расчет диэлектрических свойств и эффективных масс тяжелых электронов и дырок для азидов двухвалентных металлов**
Гордиенко Алексей Болеславович, д.ф.-м.н.
e-mail: *filippovdaniil@kemsu.ru* стр. 123

Хацаюк Вероника Викторовна, 4 курс
Симферополь, Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт
**Двухрезонансный плазмон-поляритонный сенсор**
Бержанский Владимир Наумович, д.ф.-м.н.
e-mail: *veronika74069@yandex.ru* стр. 125

Шихова Евгения Петровна, 3 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
**Мессбауэровское исследование магнитных свойств твердого раствора $BiFe1-xCrxO_3$**
Кубрин Станислав Петрович, к.ф.-м.н.
e-mail: *zhes1999@yandex.ru* стр. 127

Шляхова Софья Алексеевна, 3 курс
Ростов-на-Дону, Южный федеральный университет, физический
**Влияние катионных замещений на магнитные свойства твердого раствора $1-xBiFeO_3-xPbFe0.5Sb0.5O_3$ исследованное методами мессбауэровской спектроскопии**
Кубрин Станислав Петрович, к.ф.-м.н.
e-mail: *sofia.shlyhova@gmail.com* стр. 128

# Термоэлектрические и тепловые свойства полупроводниковых сплавов $K_xCu_{2-x}S$(x=0.1, 0.15, 0.2, 0.25)

***Баишева Алия Хазинуровна[1],***
***Сахабаева Сайра[2], Галиева Роза Ибрагимовна[1]***
*[1]Башкирский государственный университет*
*[2]Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева*
*Балапанов Малик Хамитович, д.ф.-м.н.*
aliya-baisheva@yandex.ru

Суперионные полупроводниковые халькогениды являются перспективными полупроводниковыми материалами для использования в термоэлектрических генераторах, солнечных элементах, оптических устройствах [1-3].

Целью данной работы было исследование влияния легирования калием на термоэлектрические и тепловые свойства сульфида меди. Известно, что на электрические и тепловые свойства поликристаллических полупроводниковых материалов значительно влияет размер зерен и дефектная структура материала. Исходя из этого, в данной работе были поставлены следующие задачи:

1. Получение составов $K_xCu_{1,85}S$ (x=0.1,0.15,0.2,0.25) и оценка размеров частиц порошка. Компактирование образцов для измерений. Отжиг образцов, оценка размеров зерен.
2. Определение фазового состава образцов методом рентгенофазового анализа и методом ДСК.
3. Измерение температурной зависимости электронной проводимости, электронной термо-э.д.с. и теплопроводности образцов $K_xCu_{2-x}S$ в области температур 20-400 $^oC$.
4. Анализ результатов и оценка термоэлектрической эффективности изучаемых составов.

Образцы в виде порошка были получены методом реакции замещения в расплаве NaOH и KOH при температуре 165 $^oC$. Размеры частиц синтезированного порошка находились от 20 до 200 нм. Для измерений кинетических параметров были методом холодного прессования скомпактированы поликристаллические образцы размерами 2x5x20 $мм^3$.

Рентгенофазовый анализ образцов проводился при комнатной температуре на дифрактометре D8 ADVANCE ECO фирмы Bruker с Cu $K_\alpha$-излучением.

По результатам рентгенофазового анализа образца $K_{0.2}Cu_{1.8}S$ при комнатной температуре он представляет собой смесь различных фаз сульфида меди: кубической $Cu_{1.84}S$, кубической $Cu_2S$, ромбоэдрической $Cu_{17}S_9$ и тетрагональной $Cu_2S$. Кубическая фаза $Cu_{1.84}S$ и сосуществующая с ней кубическая фаза $Cu_2S$ составляют практически 70 % в общем составе фаз образца $K_{0.2}Cu_{1.8}S$. Известна работа T. Ohtani et al. [4] об образовании квазиодномерного канального проводника $KCu_7S_4$ ($K_{0.25}Cu_{1.75}S$) с тетрагональной структурой типа $I\bar{4}$ в интервале температур от 0 до 273 К. Ионы калия в этой структуре расположены внутри тетрагональных $Cu_4S_4$-цепочек. Также известна работа Li et al. [1], в которой описывается образование клатратной структуры в нитевидных кристаллах $KCu_{7-x}S_4$, имеющих свойства фононного стекла и электронно-жидкого кристалла. Из-за сильного различия в способе синтеза наши образцы не являются однофазными клатратами, однако, судя по низкой теплопроводности, также имеют свойства фононного стекла.

В работе представлены результаты измерений температурных зависимостей электронной проводимости, коэффициента электронной термо-э.д.с. и теплопроводности образцов $K_xCu_{2-x}S$ в области температур 20-400 $^oC$. Анализ результатов показал, что из исследованных материалов наиболее перспективные свойства (ZT~0.8 при 200 $^oC$) для термоэлектрических применений имеют сплавы состава $K_{0.15}Cu_{1.85}S$.

Список публикаций:

*[1]. Xi. Li, Ch. Hu, Xu. Kang, Q. Len, Yi Xi, K. Zhanga and H.Liu. // J. Mater. Chem. A. 2013. V.1. P.13721.*
*[2]. Balapanov M.K., Ishembetov R.K., Kuterbekov K.A., Nurakhmetov T.N., Urazaeva E.K., Yakshibaev R.A. // Inorg mater. 2014. V.50. P. 930.*
*[3]. Balapanov M. Kh., Ishembetov R.Kh., Kuterbekov K.A., Kubenova M.M., Almukhametov R.F., and Yakshibaev R.A. // Ionics. 2018. V.24. N5. P. 1349.*
*[4].Ohtani T., Ogura J., Yoshihara H. and Yokota Y. // J. Solid State Chem. 1995. V.115. P.379.*

# Исследование режимов спекания кальцийфосфатных мишеней разного состава для ВЧ магнетронного напыления биопокрытий

***Болат-оол Анна Андрияновна***

***Просолов Константин Александрович, Химич Маргарита Андреевна, Белявская Ольга Андреевна***

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет*

*Шаркеев Юрий Петрович, д.ф.-м.н.*

anna_bolat-ool@mail.ru

Улучшение биосовместимости металлических внутрикостных имплантатов достигается созданием промежуточного слоя между ним и костью, обладающего оптимальными физическими, механическими и биологическими свойствами. Интерес к покрытиям на основе фосфатов кальция определяется их высоким химическим сходством с минеральной составляющей костной системы. Среди методов нанесения биосовместимых покрытий на медицинские имплантаты метод высокочастотного (ВЧ) магнетронного распыления привлекает возможностью получения покрытий из диэлектрических материалов, чистотой, равномерностью покрытия по толщине, высокой адгезионной прочностью. Для реализации метода ВЧ магнетронного распыления необходимо решение задачи создания мишени из хрупкого материала, представляющей собой плоский тонкий диск (3-4 мм) большого диаметра (порядка 110 мм) и обладающей прочностью, достаточной для закрепления на катоде.

В работе проведены исследования режимов спекания мишеней, сформированных методом одноосного прессования из порошков гидроксиапатитового (ГА) состава с частичными замещениями катионов $Ca^{+2}$ в элементарной ячейке катионами $Zn^{+2}$ и $Cu^{+2}$: ($Ca_{9,6}Zn_{0,4}(PO_4)_6(OH)_2$ (Zn-ГА), $Ca_{9,8}Cu_{0,2}(PO_4)_6(OH)_2$ (Cu-ГА)), полученных методом механохимического синтеза, характеризующихся удельной поверхностью не более 1,5 $м^2/г$.

Спекание – процесс уплотнения и объединения частиц порошка под действием высоких температур, вследствие которого происходит упрочнение материала. Из исследований процессов спекания керамики на основе ГА известно, что типичными процессами, влияющими на свойства однофазной керамики, являются уплотнение материала за счет сокращения пористости, рекристаллизация и каталитическое действие, оказываемое парциальным давлением паров воды в атмосфере [1]. Выбор режимов спекания ГА керамики осложняется возможной потерей радикалов гидроксильной группы и распадом ГА при высоких температурах на окись кальция, трикальцийфосфат, тетракальцийфосфат, а в вакууме возможной диссоциацией ГА до образования фазы оксида фосфора ($P_2O_5$). Известно также, что увеличение размера частиц исходного порошка ГА приводит к значительному повышению температуры начала интенсивной усадки при спекании. Спекание в вакууме ГА керамики начинается при более низких температурах, чем в воздушной атмосфере, а частичное замещение в структуре ГА катионов $Ca^{+2}$ на другие катионы может способствовать активизации спекания, связанной с реакциями дефектообразования.

Исследуемые режимы спекания были определены на основе собственного опыта и информации из литературных источников. Спекание мишеней проводилось в нескольких режимах в воздушной среде и в вакууме. Спеченные мишени исследовались методом рентгенофазового анализа (РФА) на дифрактометре ДРОН-7 в ЦКП «НАНОТЕХ» ИФПМ СО РАН в $CoK_\alpha$- излучении. Рентгеновские профили, полученные при съемке мишеней, спеченных при разных режимах, показаны на рисунке 1. Также были рассчитаны соотношения параметров кристаллических решеток *c/a* Zn-ГА мишеней.

Однофазность и плоскостность мишеней состава Zn-ГА с удельной поверхностью 1,5±0,1 $м^2/г$ обеспечивается спеканием во всех исследованных режимах: в воздушной среде с максимальной температурой $T_{max}$ = 1150 °С (мишень 1), в воздушной среде с $T_{max}$ = 1050 °С (мишень 3) и спеканием в две стадии – в воздушной среде с $T_{max}$ = 1100 °С на первой стадии, затем в вакууме с $T_{max}$ = 1150°С на второй стадии (мишень 2). Наибольшей интенсивностью и четким разделением отличаются пики профилей для мишеней, спеченных в две стадии и в воздушной среде с $T_{max}$ = 1150°С. По результатам расчетов замечено, что соотношение *c/a* для решеток мишеней, обладающих наибольшей интенсивностью пиков, имеют более высокое значение, что скорее всего, является характеристикой степени спекания мишеней.

Однофазность и плоскостность Cu-ГА мишеней с удельной поверхностью 0,7±0,1 $м^2/г$ достигается сложнее, чем для мишеней состава Zn-ГА, спрессованных из порошка с более высокой удельной поверхностью (1,5±0,1 $м^2/г$). Из двух исследованных режимов – в воздушной среде при $T_{max}$ = 1150 °С (мишень 5) и в вакууме при $T_{max}$ = 1150 °С (мишени 4 и 6), плоская и однофазная мишень получена только в первом режиме. Спекание в вакууме требует дополнительного исследования, поскольку в мишени, спеченной в использованном режиме, обнаружены дополнительные фазы $Ca_3(PO_4)_2$ и $P_2O_5$.

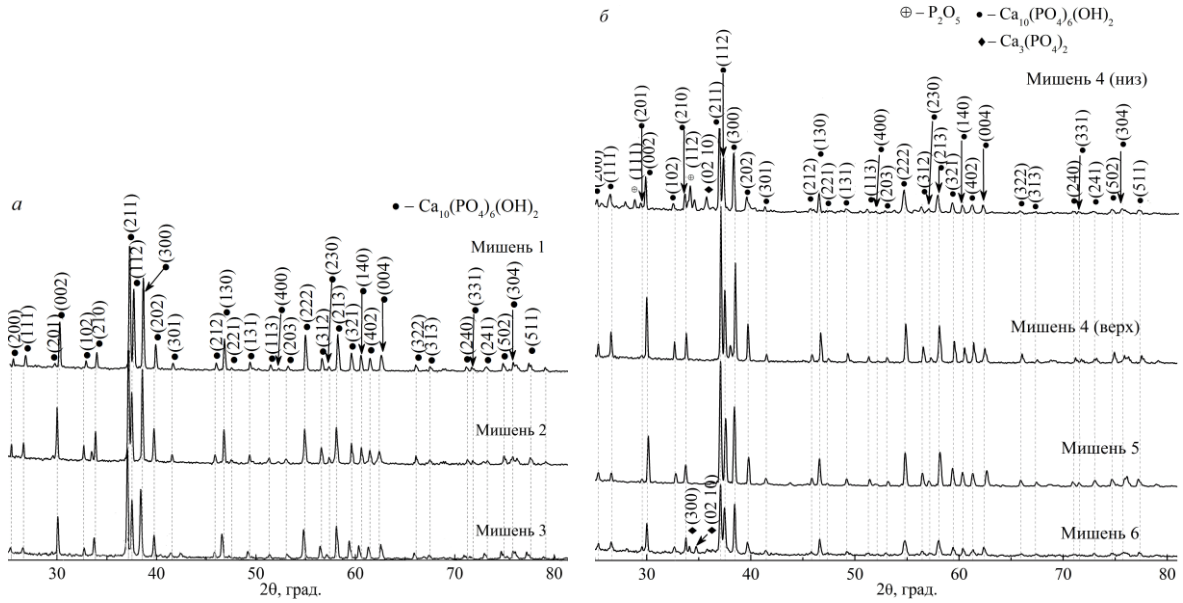



*рис.1. Рентгеновские профили мишеней гидроксиапатитового состава (а – Zn-ГА, б – Cu-ГА), спеченных при разных режимах*

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013-2020 годы, направление III.23.2.5, в ИФПМ СО РАН. Авторы выражают благодарность специалистам ЛФХВМ (зав. лаб. д.т.н. Лернер М.И.) за проведение исследований удельной поверхности порошков и специалистам ИХТТМ, д.х.н. Чайкиной М.В. за подготовку катионозамещенных гидроксиапатитов с сопроводительной информацией по результатам исследований.

Список публикаций:

*[1] Баринов С. М., Комлев В. С. // Биокерамика на основе фосфатов кальция. М.: Наука, 2005. 203 с.*

## Исследование тонкой кристаллической структуры спеченных керамик $ZrO_2$ и $ZrO_2$-$ZrB_2$ после ударно-волнового компактирования

***Бурдуковский Владимир Николаевич***

***Буяков Алесь Сергеевич***

*Национальный исследовательский Томский государственный университет*

*Кульков Сергей Николаевич, д.ф.-м.н.*

vladimirburdukovsky@gmail.com

Керамики на основе $ZrO_2$ и $ZrO_2$-$ZrB_2$ являются перспективными материалами, обладающими высокой твёрдостью, прочностью и износостойкостью [1, 2]. Данные материалы востребованы в нефтегазовой промышленности, металлургии, медицине и др.

Керамики на основе $ZrO_2$ и $ZrB_2$ относятся к труднопрессуемым. Одним из методов прессования данных керамик является ударно-волновое компактирование [3], обеспечивающее существенно большее уплотнение по сравнению с традиционными методами. Исследовательские работы ряда авторов в данной области ведутся долгое время, однако, существует недостаток данных о влиянии такого вида компактирования на кристаллическую и микроструктуру материалов.

Целью данной работы является исследование тонкой кристаллической структуры спечённых керамик $ZrO_2$ и $ZrO_2$-$ZrB_2$ после ударно-волнового компактирования.

Образцы $ZrO_2$ и $ZrO_2$-$ZrB_2$ получены ударно-волновым компактированием с последующим спеканием в воздушной печи при температуре 1600 $^oC$ с изотермической выдержкой в течение часа. Для исследования тонкой кристаллической структуры материалов были сняты рентгенограммы на дифрактометре ДРОН-3 в условиях фильтрованного Co-$k_\alpha$ излучения (длина волны $\lambda = 1{,}789$ Å) в угловом диапазоне от $25^o$ до $65^o$ с шагом $0.05^o$ и временем экспозиции 3 с. Были оценены параметры кристаллической решетки [4], средний размер областей когерентного рассеяния (ОКР), микродисторсия и величина напряжений второго рода.

Обнаружено, что после отжига при 1600 °C $ZrO_2$ представлен моноклинной фазой, параметр a – уменьшился на 0,08 %, b – увеличился на 0,34 %, c – уменьшился на 0,49 % относительно табличных значений [JCPDS #13-307]. В $ZrO_2$-$ZrB_2$ параметры моноклинного диоксида циркония: a – уменьшился на 0,42 %, b – уменьшился на 0.5 %, c – уменьшился на 0,46 %; параметры $ZrB_2$ a и b – уменьшились на 0,618 %, а параметр c – уменьшился на 0,1 % относительно табличных значений [JCPDS #34-423].

Значения полученных микроискажений, среднего размера областей когерентного рассеяния и напряжений второго рода приведены в таблице.

| Материал | Фаза | $\varepsilon$ ($10^{-3}$) | D (нм) | $\sigma_{micro}$ (МПа) |
|---|---|---|---|---|
| $ZrO_2$ | моноклинная | 1 | 70 | 300 |
| $ZrO_2$-$ZrB_2$ | моноклинная | 2,5 | 65 | 450 |
| $ZrO_2$-$ZrB_2$ | гексагональная | 6 | 40 | 3000 |

Показано, что после ударно-волнового компактирования $ZrO_2$ представлен кубической и моноклинной фазой, а после отжига при температуре 1600 °C только моноклинной. Отжиг приводит к релаксации напряжений второго рода и уменьшению микродисторсии и росту среднего размера ОКР в $ZrO_2$. В то же время средний размер ОКР $ZrB_2$ снижается, а микроискажения кристаллической решетки растут.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00304

Список публикаций:

*[1]Kulkov S.N Porosity and mechanical properties of zirconium ceramics // AIP Conference Proceedings. – 2014. – V. 1623. – No. 1. – P. 225−228.*

*[2]Kulkov S.N Rheology and porosity effect on mechanical properties of zirconia ceramics // Építöanyag. – 2015. No. 4. – P. 155.*

*[3]Первухин Л.Б. и др. Компактирование взрывом керамических порошков // Письма о материалах 2015. Т. 5. № 1. С. 57-60.*

*[4]Hannink R. H. and Garvie R. C. Subeutectoid aged Mg-PSZ alloys with enhanced thermal up-shock resistance // J. Mater. Sci. – 1982. – V. 1 – No. 7. –P. 2837-2843.*

## Влияние 10МэВ пучка электронов на оптические свойства прозрачной керамики $MgAl_2O_4$

***Вагапов Александр Шамильевич*[1]**

[1]*Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина*

[2]*Институт геологии и геохимии УрО РАН*

*Киряков Арсений Николаевич[1], Зацепин Анатолий Федорович[1], Щапова Юлия Владимировна[1,2]*

Alexander1705q@icloud.com

Керамики магний-алюминиевой шпинели (МАШ) интенсивно исследуются ввиду их высокой радиационной и химической стойкости, широкого окна оптического пропускания (0,2-5,5мкм), большой механической прочности. Легирование МАШ ионами переходных металлов позволяет получать люминесценцию в разных диапазонах спектра. Монокристаллы шпинели, легированные марганцем, титаном или хромом могут быть использованы в качестве активных сред твердотельных лазеров. Известно, что керамики МАШ, полученные различными методами, обладают частичной катионной инверсией, то есть ион $Al^{3+}$ в тетраэдрическом положении $Mg^{2+}$ и наоборот. Такие anti-site дефекты (ADs) могут выступать в качестве ловушек носителей заряда. С другой стороны, облучение прозрачных керамик ионизирующим излучением стимулирует образование дополнительных анионных и катионных дефектов в различном зарядовом состоянии. Влияние 10МэВ пучка электронов на оптические свойства МАШ до конца не установлено. В связи с чем цель работы заключалась в исследовании оптических свойств МАШ до и после облучения ускоренными электронами.

Микрокристаллические образцы прозрачной МАШ получены из Санкт-Петербургского университета имени Петра Великого. Аттестация образцов проводилась методами СЭМ и РФА. Образцы содержат 100% фазы MgAl2O4 пространственная группа $Fd\bar{3}m$. Размер зерен составляет 5-15 мкм. Спектры оптического поглощения измерены на спектрофотометре Lambda 35 (Perkin Elmer), спектры фотолюминесценции записаны на CCD камеру при возбуждении лазером с энергией 2,53эВ. Облучение быстрыми электронами выполнено на линейном ускорителе электронов UERL – 10C в Уральском Федеральном Университете (E = 10 МэВ, флюенс $10^{17}$ e/cm$^2$).

На (рис 1) представлены спектры оптического поглощения прозрачной керамики МАШ до и после облучения ускоренными электронами. Разложение разностной кривой на гауссианы показывает, что в низкоэнергетической части спектра образуются V – центры окраски (катионные вакансии, либо поглощения примесных катионов типа $Cr^{3+}$, $Mn^{2+}$). В диапазоне от 3.5 до 4.5 эВ регистрируются центры, образованные ADs с захваченными электроном или дыркой. УФ область характеризуется поглощением $F^+$ и F – центров (анионные вакансии с одним или двумя захваченными электронами) с энергией максимумов 4.75 и 5.3 эВ соответственно. При энергии фотонов свыше 5.5 эВ наблюдаются полосы поглощения, которые могут быть связаны с $F^2$ либо $F^{2+}$ – агрегатными анионными вакансиями.

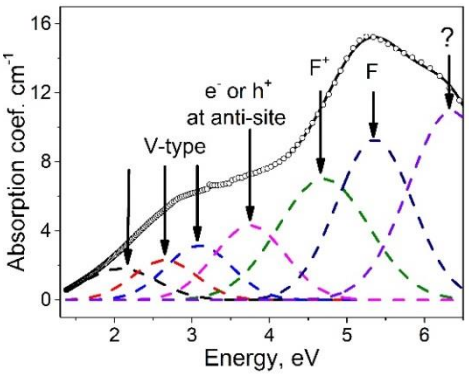



*рис. 1. Изменение коэффициента абсорбции до и после обучения электронами*

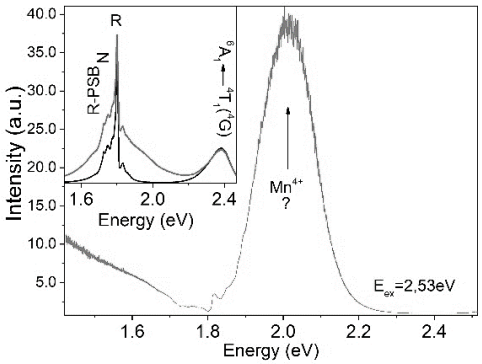



*рис.2. Пик люминесценции в 2эВ и полосы люминесценции примесных ионов $Cr^{3+}$ и $Mn^{2+}$*

Фотолюминесценция исходных керамик при лазерном возбуждении в 2.53эВ (рис 2) характеризуется свечением примесных ионов $Cr^{3+}$ и $Mn^{2+}$ в диапазонах 1.5 – 1.85эВ, 2.2 – 2.45эВ соответственно. Облучение 10МэВ электронами приводит к образованию дополнительной полосы, разрешить которую можно при нормировании на исходный спектр люминесценции. Люминесценция в 2 эВ предположительно, связана со свечением ионов марганца в отличном от Mn2+ состояния.

Таким образом показано, что при облучении МАШ 10МэВ пуском электронов образуются оптически-активные центры в видимом и УФ диапазонах спектра, а также образуется новая полоса люминесценции в 2 эВ, природа которой не установлена.

## Подготовка сплавов Гейслера системы Ni-Mn-Ga для деформационно-термической обработки методом ковки

***Габдрахманова Лилия Айратовна*[1]**

***Мусабиров Ирек Ильфирович*[2], *Сафаров Ильфат Миндигалеевич*[2], *Галеев Рафаил Мансурович*[2], *Гайфуллин Руслан Юнусович*[1], *Абдуллина Динара Рамиловна*[1], *Коледов Виктор Викторович*[3]**

[1]*Башкирский государственный университет*

[2]*Институт проблем сверхпластичности металлов РАН*

[3]*Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН*

[1,2]*Мулюков Радик Рафикович, д.ф.-м.н.*

la-gabdrahmanova@mail.ru

Перспективные функциональные сплавы Гейслера системы Ni-Mn-Ga, демонстрирующие такие эффекты как ферромагнитный эффект памяти формы, магнитокалорический эффект и др., обладают рядом недостатков. В литом состоянии они хрупкие и подвержены разрушению при термоциклировании через температуру мартенситного превращения. Одним из методов решения данной проблемы является деформационно-термическая обработка (ДТО) литых поликристаллических сплавов. Одним из оптимальных и наиболее подходящих является обработка методом всесторонней изотермической ковки (ВИК). С помощью данного метода возможно получение объемной заготовки сплава с требуемой микроструктурой. Кроме того за счет комбинирования схем осадка-протяжка достигается однородная деформация и соответственно однородная микроструктура по объему заготовки. Возможно внесение в материал значительной энергии на единицу массы – намного больше, чем при использовании известных методов интенсивной пластической деформации, таких как кручение под давлением и равноканальное угловое прессование.

Стандартная методика выплавки сплавов Гейслера системы Ni-Mn-Ga заключается в выплавке сплава методом аргонно-дуговой плавки. Поскольку выплавка проводится на водоохлаждаемом медном тигле, то при кристаллизации расплава идет интенсивный рост кристаллов от низа слитка. В нем формируются крупные,

вытянутые зерна. В результате внутренних напряжений, вызванных мартенситным превращением, по границам крупных зерен формируются микротрещины. Так же в приповерхностном слое (~ 1 мм) нередко образуются микропоры. Такая структура непригодна для ДТО. Кроме того заготовка в форме «таблетки так же не пригодна для данного метода обработки. С целью устранения данных недостатков, а также для очистки (дегазации) слиток сплава был подвергнут индукционной вакуумной переплавке. Для этого после аргонно-дуговой выплавки расплав был залит в кварцевый стакан. Затем остывший слиток в новом кварцевом стакане помещался в индукционную вакуумную печь. Индукционным нагревом в вакууме $10^{-1}$ Па сплав доводили до расплавленного состояния и затем медленно кристаллизовали. Стоит отметить, что переплавка в кварцевом стакане приводит к диффузии атомов Si и равномерному распределению по объему слитка сплава. Как показывают дальнейшие исследования, добавление в состав Si приводит только к снижению температуры мартенситного превращения.

Анализ микроструктуры полученного слитка выполнен с помощью растровой электронной микроскопии в режиме BSE. Он показывает, что в структуре наблюдаются равноосные зерна 100-500 мкм, практически отсутствуют микропоры и микротрещины. Таким образом, микроструктура сплава после индукционной вакуумной переплавки пригодна для дальнейшей деформационно-термической обработки.

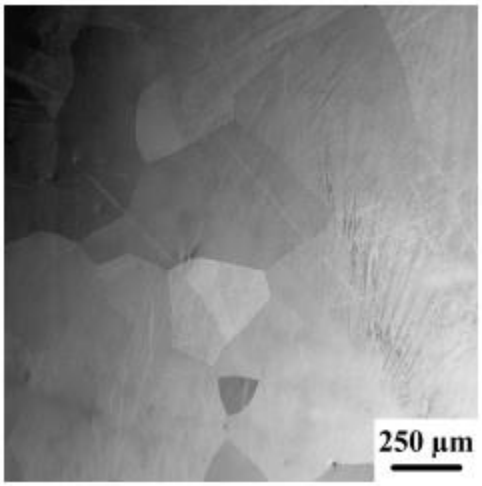



*рис. 1. Микроструктура сплава Ni54.1Mn19.6Ga24.6Si1.7 в исходном литом состоянии*

Еще одним положительным моментом такого метода подготовки сплава является отсутствие необходимости для дальнейшей термической обработки с целью выравнивания атомного состава и реализации в нем мартенситного превращения. Известно, что на сплавах данной системы гомогенизационный отжиг занимает от нескольких часов до нескольких дней. В нашем случае процесс равномерного перераспределения атомов происходит в процессе индукционного разогрева сплава и некоторая выдержка в околоплавильных температурах.

Работа выполнена на базе Центра коллективного пользования ИПСМ РАН «Структурные и физико-механические исследования материалов».

## ИК-спектр молекулярных кристаллов $C_7H_{16}NO_2(Cl)$ и $C_5H_{14}NO(Cl)$

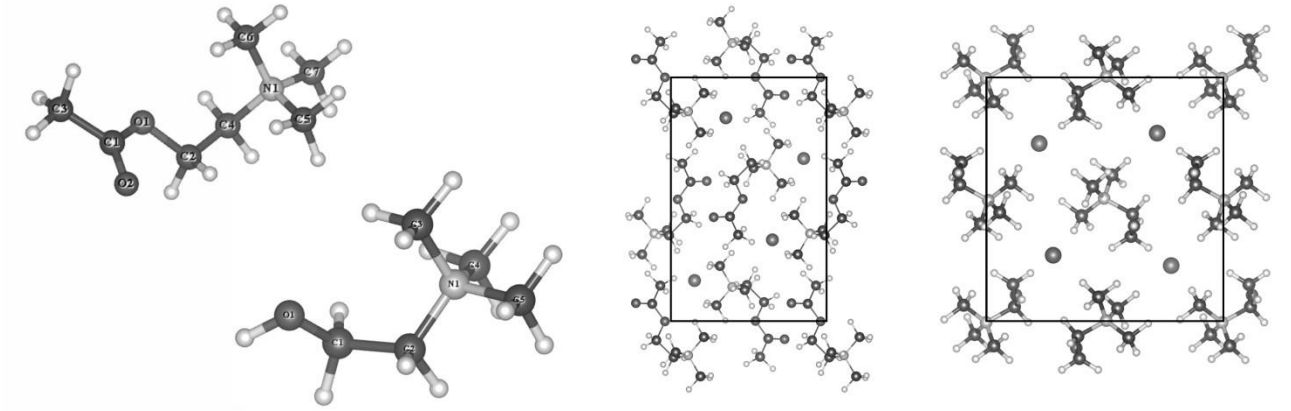
***Гордиенко Кирилл Алексеевич***
*Кемеровский государственный университет*
*Журавлев Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.*
gordie-kirill@rambler.ru

В настоящее время молекулы ацетилхолина и холина (рис.1) активно применяются в медицине и биотехнологии из-за того, что они играют существенную роль в передаче нервных импульсов, как в периферической, так и в центральной нервной системе [1]. Это ставит задачу теоретических исследований кристаллических структур данных молекул, результаты которых затем могут быть использованы для производства лекарственных средств как для лечения болезней связанных с нарушением когнитивных функций, так и для повышения производительности труда.

Расчеты в данной работе проводились с использованием пакета Crystal [6], основанного на теории функционала плотности. Использовался B3LYP функционал с дисперсионной поправкой D3 [7], которая позволяет корректно учитывать межмолекулярное взаимодействие.

Молекулярные кристаллы $C_7H_{16}NO_2(Cl)$ и $C_5H_{14}NO(Cl)$ имеют орторомбическую кристаллическую решетку, с симметрией $P2_12_12_1$ (рис.1). Отличия молекул двух кристаллов заключаются в наличии функциональной группы $CH_3CO_2$ в молекуле ацетилхолина. Параметры решетки, полученные путем оптимизации геометрии для кристалла $C_7H_{16}NO_2(Cl)$ *a=9.65(Å), b=15.12(Å), c=6.22(Å)*, для кристалла $C_5H_{14}NO(Cl)$ *a=10.72(Å), b=11.47(Å), c=5.74(Å)*. Данные по длинам связей приведены в таблице. Проведено сравнение с работами других авторов и экспериментом:

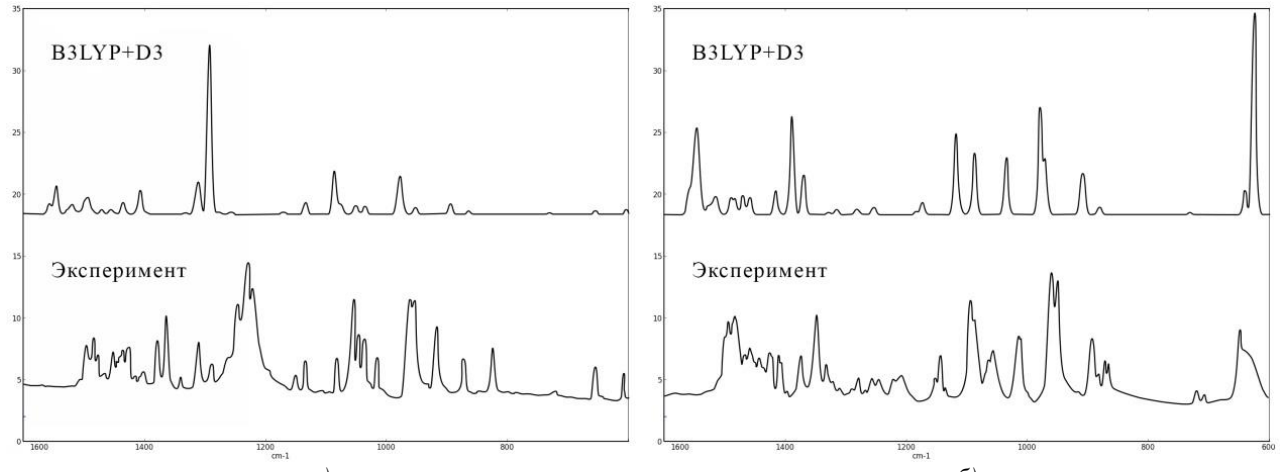
| $C_7H_{16}NO_2(Cl)$ | | | | $C_5H_{14}NO(Cl)$ | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Связь | Данная работа | Расчет [2] | Эксперимент [3] | Связь | Данная работа | Эксперимент [4] | Расчет [5] |
| $O_1$-$C_2$ | 1.442 | 1.443 | 1.443 | $O_1$-$C_1$ | 1.425 | 1.427 | 1.440 |
| $C_2$-$C_4$ | 1.510 | 1.509 | 1.509 | $C_1$-$C_2$ | 1.517 | 1.518 | 1.461 |
| $C_4$-$N_1$ | 1.516 | 1.511 | 1.511 | $C_2$-$N_1$ | 1.516 | 1.529 | 1.559 |
| $N_1$-$C_6$ | 1.498 | 1.496 | 1.496 | $N_1$-$C_3$ | 1.500 | 1.508 | 1.491 |
| $N_1$-$C_7$ | 1.502 | 1.499 | 1.499 | $N_1$-$C_4$ | 1.505 | 1.511 | 1.507 |
| $N_1$-$C_5$ | 1.508 | 1.505 | 1.505 | $N_1$-$C_5$ | 1.505 | 1.513 | 1.509 |



*а) б) в) г)*

*рис.1. Молекула а) Ацетилхолина б) Холина. Структура кристалла в) $C_7H_{16}NO_2(Cl)$ г) $C_5H_{14}NO(Cl)$*

Как видно из таблицы 1, результаты данной работы имеют хорошее соответствие как с первопринципными расчетами [2], [5], так и с экспериментальными данными. Для кристалла $C_5H_{14}NO(Cl)$ соответствие с экспериментом лучше, чем в работе [5]. Соответствующие связи в обеих молекулах в кристаллах имеют практически идентичные длины. Результаты расчета ИК спектров кристаллов представлены на рисунке 2, в области от 1600 $см^{-1}$ до 600 $см^{-1}$.




*а) б)*

*рис.2. ИК-спектр кристалла а) $C_7H_{16}NO_2(Cl)$ б) $C_5H_{14}NO(Cl)$*

Как видно из рисунка 2, полученные в данной работе ИК спектры имеют хорошее соответствие с экспериментом. Видно общее смещение спектров нашей работы в более высокочастотную область по сравнению с экспериментом. Например, для кристалла ацетилхолина пики, отвечающие изгибным и

качательным модам четырех групп $CH_3$ в эксперименте равны 1249 $см^{-1}$, 1231 $см^{-1}$, 1223 $см^{-1}$, а в нашей работе соответственно 1314 $см^{-1}$, 1308 $см^{-1}$ и 1277 $см^{-1}$. Для кристалла холина пик, отвечающий качательным модам $CH_3$ группы равен 960 $см^{-1}$, а моде растяжения N-$CH_2$ группы 949 $см^{-1}$; в нашей работе 979 $см^{-1}$ и 969 $см^{-1}$ соответственно. Для более объективного сравнения был выполнен расчет коэффициентов корреляции настоящего расчета с результатами эксперимента: *0.94* для $C_7H_{16}NO_2(Cl)$ и *0.91* для $C_5H_{14}NO(Cl)$, что показывает хорошее соответствие.

Таким образом, на основе хорошего соответствия полученных спектров и экспериментальных можно сделать вывод о том, что вычисления с использование теории функционала плотности могут хорошо описывать геометрические и динамические свойства систем с водородными связями. На данном этапе мы можем сделать вывод о возможности использовать данный метод для исследования свойств молекулярных кристаллов, для которых нет экспериментальных данных.

Список публикаций:
*[1] R.W. Alder // Chem. Soc. Prekin. Trans 2. 1998. № 10. C. 2083-2108.*
*[2] F. Karla // Acta Cryst. 1996. T. B52. C. 184-193.*
*[3] A. Pawlukojc // Vibrational Spectroscopy. 2016. T. 82. C. 37-43.*
*[4] D. Templeton // Acta Cryst. 1960. T. 13. C. 281.*
*[5] A. Pawlukojc // Chem. Phys. 2014. T. 445. C. 31-37.*
*[6] R. Dovesi // WIREs Comput. Mol. Sci. 2018. T. e1360.*
*[7] S. Grimme // Chem. Phys. 2010. T. 132. C.154104.*

## Исследование теплостойкости полимерных материалов с помощью вероятностно-статистических подходов

***Денисова Алена Николаевна***
***Новичихина Татьяна Ивановна***
*Алтайский государственный педагогический университет*
*Насонов Алексей Дмитриевич*
tnovichihina@mail.ru

Основной проблемой исследования влияния старения на границы теплостойкости полимерных материалов является обработка результатов с помощью вероятностно-статистических подходов. Для решения этой проблемы в настоящее время используется компьютерная обработка результатов научного эксперимента.

В настоящее время информационные технологии все чаще используются при математической обработке экспериментальных результатов [1, 2]. В настоящей работе для обработки экспериментальных данных по влиянию старения на физические свойства полимерных композитных материалов (ПКМ) выбрана программа Sp 120, представляющая собой визуализатор, который аппроксимирует экспериментальные данные с помощью алгоритма B-сплайн. Аппроксимация экспериментальной кривой проводилась так, чтобы отклонение этой функции от экспериментальной кривой в заданной области было наименьшим. В качестве исходной кривой выбиралась экспериментальная зависимость динамического модуля сдвига от температуры. Построение первой производной зависимости G = f(T) позволяла определить точки экстремумов, а по ним температуры для соответствующих релаксационных переходов. Экстремальные точки на кривой второй производной дали возможность определить температурные границы этих переходов. Таким образом, были определены температуры стеклования как для исходных полимерных материалов, так и подвергнутых старению.

Для исследований выбраны образцы ПКМ, где связующим использовалась эпоксидная смола Epikote-828, а наполнителем служила углеродная ткань.

Образцы представляли собой полосок размером 58x8x1 мм. Время старения экспериментальных образцов ПКМ составляло 102, 456, 1501 сутки.

В ходе проведения эксперимента были получены результаты, представленные на рисунках 1 и 2.

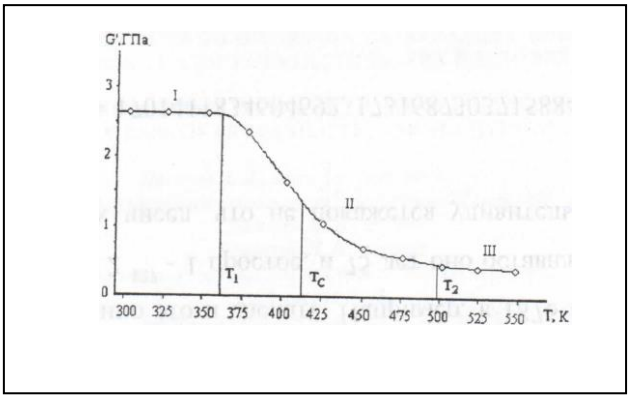



*рис.1. Температурная зависимость динамического модуля сдвига для исходного образца КМУ-4Л*

Характеристические температуры ПКМ, подвергнутых атмосферному воздействию, в зависимости от длительности приведены в таблице 1.

Таблица 1

| Материал | τ, сут. | $T_1$, К | $T_C$, К | $T_2$, К |
|---|---|---|---|---|
| КМУ-4Л | 0 | 360 | 416 | 498 |
| | 102 | 383 | 435 | 491 |
| | 456 | 406 | 456 | 508 |
| | 1501 | 435 | 461 | 525 |

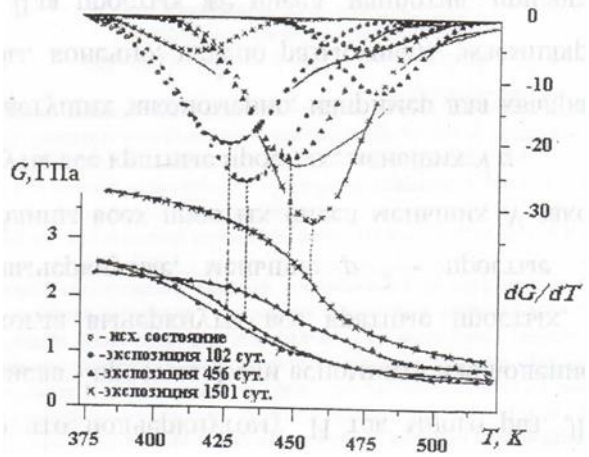



*рис.2. Картина релаксационных процессов в углепластике КМУ-4Л при различных сроках старения*

Из таблицы видно, что с увеличением длительности старения температура стеклования ПКМ ($T_C$) увеличивается. Кроме того, температура начала ($T_1$) и конца ($T_2$) процесса стеклования тоже увеличиваются. Это означает, что теплостойкость ПКМ не только не уменьшается, как можно было бы предположить, а наоборот повышается с увеличением времени старения материала. Следует отметить, что разница между температурами $T_1$ и $T_2$ с увеличением времени старения ПКМ существенно уменьшается от 138 до 90 градусов. Это означает, что процесс стеклования при увеличении времени старения ПКМ происходит в более узком интервале температур.

Таким образом, использование статистической обработки экспериментальных результатов позволило оценить влияние старения на физические свойства полимерных материалов, в том числе на их теплостойкость.

Список публикаций:

*[1] Старцев О.В[.и др]. // Экспериментальные методы в физике структурно-неоднородных сред.: Изд-во Алтайского гос. ун-та. 1997.-148 с.*

*[2] Сортыяков Е.Д. [и др.] // Новые тенденции развития вероятностно-статистических знаний.:. Горно-Алтайск: Изд-во Горно-Алтайского гос. ун-та. 2013.- 105 с.*

# Электронные свойства монокристалла $WTe_2$

***Доможирова Александра Николаевна*** [1]

***Махнев Александр Афонасьевич*** [(1)], ***Шредер Елена Ивановна*** [(1)], ***Наумов Сергей Владимирович*** [(1)], ***Патраков Евгений Иванович*** [(1)], ***Чистяков Василий Владимирович*** [(1)], ***Марченкова Елена Борисовна*** [(1)], ***Huang Jung-Chun-Andrew*** [(2)]

[1] *Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН*

[2] *National Cheng Kung University, Tainan, Taiwan*

[3] *Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина*

*Марченков Вячеслав Викторович* [(1, 3)], *д.ф.-м.н.*

domozhirova@imp.uran.ru

В настоящее время поиск и изучение новых топологических материалов привлекают большой интерес исследователей. Такие материалы перспективны для применения в устройствах электроники и спинтроники, поскольку обладают уникальными электронными свойствами, возникающими вследствие их необычной зонной структуры. В последнее годы были обнаружены топологические изоляторы, вейлевские полуметаллы и топологические полуметаллы с линиями узлов, которые являются новыми квантовыми материалами, демонстрирующими уникальные физические свойства. В вейлевских полуметаллах наблюдается необычный перенос заряда на поверхности и в объеме, что открывает новые возможности их потенциального применения. Характерной особенностью вейлевских полуметаллов является наличие экзотических бесщелевых поверхностных состояний – ферми-дуг. Квазичастицами в объеме вейлевских полуметаллов являются «безмассовые» вейлевские фермионы [1]. Управлять такими квазичастицами можно гораздо быстрее, чем обычными носителями заряда, а вероятность их рассеяния достаточно мала, что делает вейлевские полуметаллы перспективными для создания устройств сверхбыстрой электроники. Недавно было обнаружено, что свойства вейлевских полуметаллов проявляются в полуметаллических дихалькогенидах переходных металлов $WTe_2$, $MoTe_2$ и трехкомпонентных соединениях $Mo_xW_{1-x}Te_2$ [2], поэтому получение новой информации об их физических свойствах представляет большой интерес. Цель данной работы – исследование электросопротивления и оптических свойств монокристалла вейлевского полуметалла $WTe_2$.

Монокристаллы $WTe_2$ были выращены методом химического газового транспорта с использованием $Br_2$ в качестве транспортного агента. Данное соединение кристаллизуется в орторомбической структуре с параметрами решетки $a$ = 3.435(8) Å, $b$ = 6.312(7) Å, $c$ = 14.070(4) Å. Структура поверхности и химический состав исследованы с помощью сканирующего электронного микроскопа FEI Inspect F, оснащенного приставкой EDAX. Температурная зависимость электросопротивления $\rho(T)$ измерена в интервале температур от 80 до 300 K по стандартной 4-контактной методике на постоянном токе. Оптические постоянные, действительная $\varepsilon_1$ и мнимая $\varepsilon_2$ части комплексной диэлектрической проницаемости, оптическая проводимость $\sigma$ и коэффициент отражения $R$, измерены эллипсометрическим методом Битти при комнатной температуре с одним отражением от плоскости образцов в диапазоне спектра 0.2-5.0 эВ.

Установлено, что измеренная температурная зависимость электросопротивления $WTe_2$ имеет металлический тип, однако его значения достаточно высоки для металлов. Оптические исследования показали, что на исследованном участке спектра монокристалл $WTe_2$ не проявляет особенностей, характерных для металлов. Спектр оптической проводимости $\sigma(\omega)$ представляет собой одну широкую полосу с центром при 3.4 эВ, сформированную межзонными переходами *(рис.1а)*. В инфракрасной области спектра отметим низкие

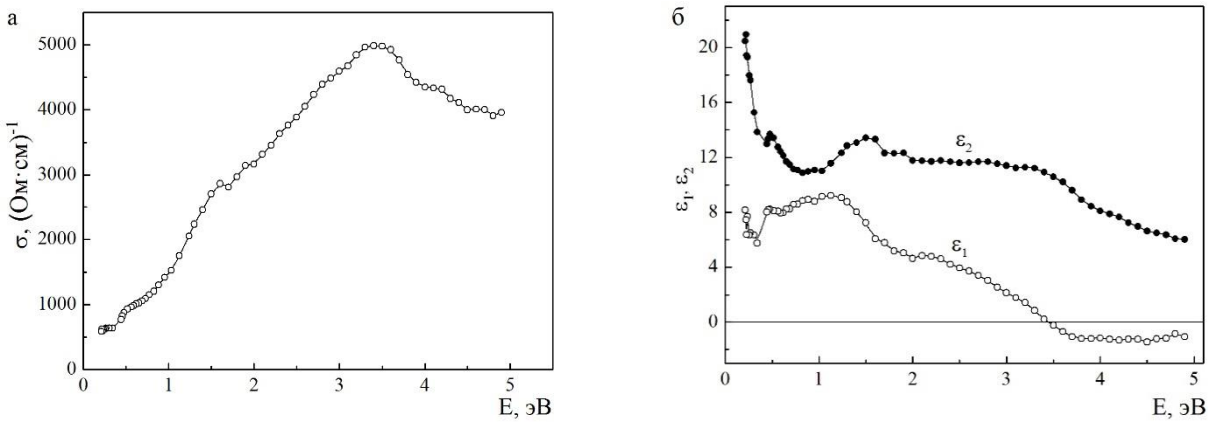



*рис.1 Дисперсия оптической проводимости σ (а), действительной $\varepsilon_1$ и мнимой $\varepsilon_2$ частей диэлектрической проницаемости (б) монокристалла $WTe_2$.*

значения мнимой части $\varepsilon_2$ диэлектрической проницаемости и положительные значения действительной части $\varepsilon_1$ *(рис.1б)*, что дает основания говорить об отсутствии вклада от свободных носителей вплоть до 0.2 эВ. Отражательная способность *R* также имеет низкие значения, изменяясь от 0.37 в ультрафиолетовой области спектра до 0.5 в инфракрасной.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Спин», № АААА-А18-118020290104-2 и «Электрон», АААА-А18-118020190098-5) при частичной поддержке РФФИ (проект № 17-52-52008), Правительства Российской Федерации (постановление № 211, контракт № 02.A03.21.0006).

Список публикаций:
*[1] Xu S.Y., Belopolski I., Alidoust N. et al. // Science. 2015. Vol.349. P.613.*
*[2] Belopolski I., Sanchez D.S., Ishida Y. et al. // Nature Communications. 2016. Vol.7. P.13643.*

## Влияние локального окружения на магнитные свойства силицидов марганца

***Драганюк Оксана Николаевна***
***Жандун Вячеслав Сергеевич, Замкова Наталья Геннадьевна***
*Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ*
*Замкова Наталья Геннадьевна, д.ф.-м.н.*
don-oks@mail.ru

Силициды переходных металлов представляют собой материалы, которые являются перспективными для использования в таких областях как спинтроника, микроэлектроника, оптоэлектроника. Особый интерес вызывают соединения с кристаллической структурой типа $DO_3$ (рис. 1), в которой имеется два неэквивалентных положения атомов переходных металлов. Одной из причин повышенного интереса к таким силицидам является возможность регулирования их магнитных свойств, например, путем легирования или изменения давления. Поскольку эти воздействия связаны с изменениями в локальном окружении, необходимо проводить теоретические исследования для понимания роли локального окружения в формировании магнитных свойств.

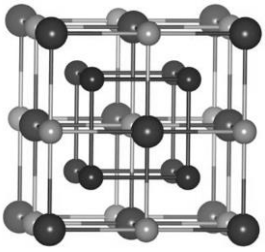


*рис.1. Структура типа $DO_3$.*

В рамках подхода, связанного с отображением результатов ab initio расчетов на мультиорбитальную модель [1], было проведено теоретическое исследование влияния локального окружения на магнитные свойства силицида марганца $Mn_3Si$, обладающего $DO_3$ структурой. $Mn_3Si$ является антиферромагнетиком с температурой Нееля $T_N$ = 23 K. Экспериментальные магнитные моменты на атомах MnI и MnII составляют $\mu_{MnI}$ = 2.40 $\mu_B$ и $\mu_{MnII}$ = -0.28 $\mu_B$. Это соединение обладает полуметаллическими свойствами, и эта особенность полезна для реализации спиновой инжекции через границу раздела металл-полупроводник. Мы используем самосогласованный подход для выявления роли, которую играют ближайшие соседи (NN) и соседи во второй координационной сфере (NNN) в формировании магнитного момента на атомах марганца. Мультиорбитальная модель описывается гамильтонианом, учитывающим взаимодействия между d-электронами атомов марганца и p-электронами атомов кремния:

$$H = H^{Mn} + H_{J'}^{Mn-Mn} + H_0^{Si} + H_{hop},\ H^{Mn} = H_0^{Mn} + H_K^{Mn} \qquad (1)$$

где $H_{hop}$ описывает межузельные перескоки в рамках формализма Слетера-Костера [2].

Модельный анализ роли локального окружения показал, что основную роль в формировании магнитного состояния в $Mn_3Si$ играет взаимодействие Mn-Mn; взаимодействия типа Mn-Si не оказывают сильного влияния на магнитные моменты на атомах марганца. Формирование магнитного момента на атоме марганца MnI обусловлено взаимодействием t1(MnI-MnII) в первой координационной сфере. Магнитный момент на атоме MnI плавно спадает с увеличением значения интеграла перескока t1. Магнитный момент на атоме марганца MnII главным образом определяется перескоками t3(MnII-MnII) во второй координационной сфере. При этом отличительной особенностью поведения магнитного момента на атоме MnII является наличие резкой границы

между немагнитным и магнитным состоянием, что приводит к резкой зависимости магнитного момента от интеграла перескока t3(MnII-MnII). Абсолютная величина магнитного момента уменьшается при увеличении интеграла перескока t3 (MnII – MnII) и при больших его значениях стремится к нулю.

Для подтверждения выводов модели был проведен сравнительный анализ результатов, полученных в модельном и ab initio расчетах. Ab initio магнитные моменты атомов MnI и MnII для различных параметров решетки вместе с модельными магнитными моментами показаны на рис. 2, верхняя шкала показывает значения интегралов перескока между атомами марганца в первой и второй координационных сферах при заданных параметрах решетки. Зависимость модельных и ab initio магнитных моментов от интегралов перескока и параметра решетки, соответственно, имеет хорошее согласие. Примечательно, что если мы изменим только один интеграл перескока t3 во второй координационной сфере, поведение модельных магнитных моментов атома MnII остается прежним, т.е. значение магнитного момента MnII определяется исключительно взаимодействием между атомами марганца во второй координационной сфере. В свою очередь, поведение магнитного момента MnI отличается: при фиксированном значении t1 (MnI-MnII) зависимость магнитного момента MnI от интеграла перескока t3 практически отсутствует. Таким образом, решающую роль в формировании магнитного момента атомов MnII и MnI играют взаимодействия MnII-MnII и MnI-MnII, соответственно, в то время как взаимодействия MnI-Si и MnII-Si не оказывает существенного влияния на формирование магнитного момента.

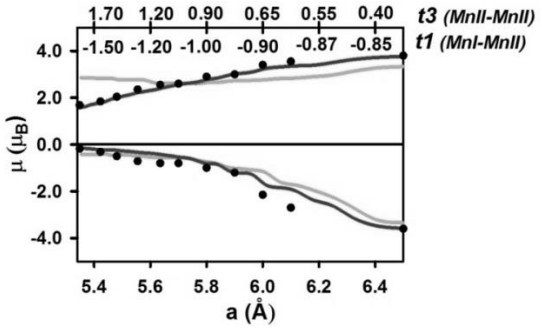



*рис.2. Зависимость магнитного момента на атомах марганца от параметра решетки и ключевых интегралов перескока. Точками обозначены значения ab initio, черная линия показывает зависимость от изменяющихся интегралов перескока t1 и t3, серая – только от интеграла перескока t3 при зафиксированном значении t1*

Используемый модельный анализ представляет не только теоретический интерес. Интегралы перескока являются наиболее чувствительными параметрами для различных типов давления. Наличие резкой границы между магнитным и парамагнитным состояниями в $Mn_3Si$ дает перспективы практического применения таких пленок (например, для включения и выключения магнитного состояния внешними полями).

Список публикаций:

*[1] N.G. Zamkova, V.S. Zhandun, S.G. Ovchinnikov, I.S. Sandalov.// Journal of Alloys and Compounds. 2017. T. 695. C. 1013-1222.*
*[2] J.C. Slater, G.F.Koster. // Phys.Rev.1954. T. 94,C. 1498*

## Гранулометрический состав хромсодержащих полититанатов калия

***Ерагер Ксения Романовна*[1]**
***Пирожков Дмитрий Алексеевич*[1], *Попова Дарья Вячеславовна* [2]**
*Челябинский государственный университет*[1]
*Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А.*[2]
*Саунина Светлана Ивановна*[1], *к.ф.-м.н.*
eragerk@rambler.ru

Керамические материалы обладают многообразием свойств, отличающих их от металлов и полимеров, таких как: высокая коррозионная стойкость, устойчивость к радиационным воздействиям, биологическая совместимостью и т.д. Реакционная способность керамического сырья зависит от его дисперсности. Меньший размер частиц дает возможность получить большую начальную плотность компакта и, как следствие, приводит к меньшей усадке спекаемых керамических изделий. Анализ фракционного состава исходного керамического сырья позволяет определять способы получения функциональной керамики и ее конечные свойства.

В работе было изучено изменение гранулометрического состава образцов полититанатов калия (ПТК), модифицированных в водных растворах нитрата хрома (III), при различных значениях pH (3, 5, 7, 9) и

подвергнутых термической обработке при 500°С. Изменение размеров частиц исходных и термообработанных образцов модифицированного ПТК было определено с использованием лазерного анализатора размеров частиц Analysette 22 Micro Tec plus, в диапазоне 0,01 – 2000 мкм. На основании полученных данных гранулометрического анализа была построена диаграмма Винклера (рис.1).

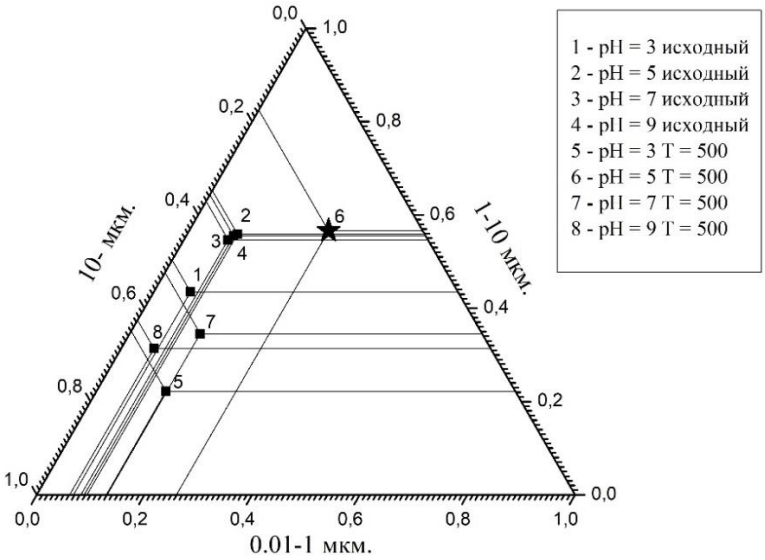



*рис. 1. Диаграмма Винклера*

По данным исследования были определены доли частиц, лежащие в областях от 0.01-1 мкм, 1-10 мкм и более 10 мкм. Так для всех исходных образцов, не прошедших термообработку, доля частиц, лежащая в области от 0.01-1 мкм менее 9%, в области 1-10 мкм составляет ~50%, а в области от 10 и более ~40 %. После термообработки при 500°С наибольшей долей частиц, лежащей в области от 1 до 10 мкм, обладает образец, модифицированный в растворе нитрата хрома при pH = 5. Авторами работы [1] было определено, что для получения высокопрочной функциональной керамики используются полититанаты калия с предпочтительным размером частиц не более 10 мкм.

Список публикаций:

*[1] Гороховский А.В. Способ получения изделий из высокоупорядоченной керамики на основе титаната калия // Патент России № 2415107. 2011г. стр 9.*

## Моделирование магнитоэлектрических и поверхностных свойств в сверхрешетках и нанопленках мультиферроиков

***Жармухаметов Айнур Ринатович***

***Нугуманов Айдар Гайсович, Юлдашева Алина Рифовна***

*Башкирский государственный книверситет*

*Шарафуллин Ильдус Фанисович*

aiderfarro@gmail.com

В работе рассматриваются фазовые переходы и влияние температуры, внешнего магнитного поля в модели сверхрешетки мультиферроика с двумя параметрами порядка методом Монте-Карло. Изучаемая структура образована чередующимися ферромагнитными и ферроэлектрическими слоями.

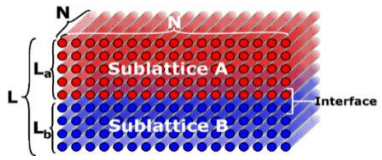



*рис.1. Схема сверхрешетки мультиферроика,*
*состоящая из ферромагнитной и ферооэлектрической подсистем*

Здесь ферромагнитные подрешетки *A* описываются моделью гейзенберга, где параметр ферромагнитного взаимодействия между спином и его ближайшими соседями считается одинаковым как внутри слоев подрешетки, так и между ними. Для описания ферроэлектрических подрешеток *B* используется кубическая

модель Изинга, где параметр ферроэлектрического взаимодействия одинаков подобно ферромагнитной подсистеме.

Гамильтониан магнитоэлектрического взаимодействия

$$H_{mf} = -\sum_{i,j,k} J_{ijk}^{mf} \left[ \vec{S}_i \times \vec{S}_j \right] \times \vec{P}_k \qquad (1)$$

Здесь $J_{ijk}^{mf} > 0$ - параметр взаимодействия между вектором электрической поляризации $\vec{P}_k$ в верхнем ферроэлектрическом слое и векторным произведением спинов $[\vec{S}_i \times \vec{S}_j]$ в нижнем ферромагнитном слое.

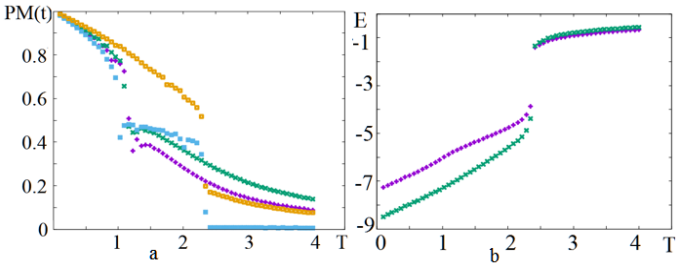



*рис.2. а) Параметр порядка PM(t) ферромагнитной подсистемы в зависимости от T в относительных величинах пропорциональных kT. Фиолетовые и зеленые точки соответствуют PM(t) для $J^{mf} = -2.5$, $H^z = 1.0$ и $J^{mf} = -2.5$, $H^z = 1.5$, голубые и желтые точки соответствуют PM(t) для $J^{mf} = -6.0$, $H^z = 0$ и $J^{mf} = -6.0$ $H^z = 1.0$. б) Энергии ферромагнитной (фиолетовые точки) и ферроэлектрической (зеленые точки) подсистем в зависимости от T для $J^{mf} = -6.0$.*

Параметр порядка *PM*(*t*) близится к значению 1 при низкой *T*, где каждый спин слабо отклоняется от основного состояния, и стремится к нулю при высокой *T* из-за сильных колебаний в парамагнитном состоянии. Заметим, что в отсутствии внешнего магнитного поля и при большом значении магнитоэлектрического параметра *($J^{mf} = -6.0$)* наблюдаются два чередующихся фазовых перехода второго рода при $T_{C1} = 1.05\ J^{m/k}{}_B$ и $T_{C2} = 2.19\ J^{m/k}{}_B$.

В работе изучено влияние магнитоэлектрической связи между ферроэлектрическим и ферромагнитным слоями системы на критическую температуру, параметры порядка, восприимчивость, внутреннюю энергию, поверхностную намагниченность системы. Построены температурные зависимости параметров порядка и восприимчивостей подрешеток, а также теплоемкости и энергии системы для различных параметров взаимодействия и поля.

Список публикаций:

*[1] Sharafullin, I. F., Nugumanov, A. G., Yuldasheva, A. R., Zharmukhametov, A. R., & Diep, H. T. (2019). Modeling of magnetoelectric and surface properties in superlattices and nanofilms of multiferroics. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 475, 453-457.*

## Исследование размерно-напряженных эффектов в боратах $ABO_3$ (A=In, Fe, Ga)

***Замковская Анастасия Игоревна***

***Наухацкий Игорь Анатольевич, Максимова Елена Михайловна***

*Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт*

*Максимова Елена Михайловна, к.ф.-м.н.*

*trabem.z@gmail.com*

Карбонат кальция ($CaCO_3$) существует в трех различных полиморфах: кальцит, ватерит и арагонит. Плоские кислородные треугольники $BO_3^{3-}$ могут замещать группы $CO_3^{3-}$, формируя бораты металлов $A^{III}BO_3$, изоструктурные различным формам $CaCO_3$. Обычно, катионы $A^{3+}$ приводят к кристаллизации структур типа кальцита $A^{III}BO_3$, принадлежащих к тригональной пространственной группе симметрии R-3c. Катионы $A^{3+}$ могут быть замещены $Fe^{3+}$, $Ga^{3+}$, $In^{3+}$, $Al^{3+}$, $Sc^{3+}$ и др. Такие соединения могут применяться в качестве магнитооптических устройств, фотолюминесцентных материалов, лазерных сред, сцинтилляционных и магнитных материалов.

С помощью дифракционного метода наряду с фазовым составом, параметрами кристаллической решетки, статическими и динамическими смещениями атомов из положения равновесия можно определить микронапряжения в решетке и размер кристаллитов. Размер кристаллитов и величина микронапряжений зависят от процесса синтеза, равновесных реакций, кинетики и фазовых изменений.

Целью работы является определение размера кристаллитов и величины микронапряжений в кристаллах бората железа $FeBO_3$, бората индия $InBO_3$ и бората галлия $GaBO_3$.

Рентгеновские исследования кристаллов бората индия и бората железа проводились на дифрактометре SmartLab (Rigaku). Использовались: Cu-Kα-излучение, графитовый монохроматор, порошковый кремний в качестве внешнего стандарта, фокусировка по Брэггу-Брентано, шаг съемки 0.02°, выдержка в каждой точке 1,2 с. Дифрактограмма бората галлия была получена на рентгеновском дифрактометре ДРОН-3 с использованием медного излучения Cu-Kα. Диапазон углов рассеяния для всех образцов $2\Theta$=20-100°.

Определение размерно-напряженных эффектов дифракционным методом основано на измерении уширения профиля дифракционного пика $\beta$. Точное определение ширины дифракционных отражений возможно только путем теоретического восстановления формы экспериментального отражения. Для аппроксимации дифракционных пиков нами была использована функция псевдо-Фойгта, являющаяся сочетанием функций Лоренца и Гаусса. Для решения вопроса о главной причине уширения (микронапряжения или размера кристаллитов) необходимо найти угловую зависимость уширения, т. е. сравнить отношение уширения $\beta$ двух линий, различающихся только порядком отражения от одной и той же совокупности плоскостей (hkl), $\beta_2/\beta_1$ с отношением $\tan\theta_2/\tan\theta_1$ и $sec\,\theta_2/\sec\theta_1$, [1]. Если отношение $\beta_2/\beta_1$ совпадает с учетом экспериментальной ошибки с отношением тангенсов, то уширение вызвано микронапряжением $\varepsilon$; если же оно совпадает с отношением секансов, то уширение связано с малым размером кристаллитов. В первом случае можно найти величину микронапряжений $\varepsilon$ по формуле Уилсона-Стокса:

$$\varepsilon = \beta_{hkl}/4\,\tan\theta \qquad (1)$$

Во втором случае можно определить размер областей когерентного рассеяния $D$ по формуле Селякова-Шеррера:

$$D = K\lambda/\beta_{hkl}\,cos\,\theta \qquad (2)$$

где $K \approx 0{,}94$, [2].

Если отношение $\beta_2/\beta_1$ находится между значениями $\tan\theta_2/\tan\theta_1$ и $sec\,\theta_2/\sec\theta_1$, то используется метод Вильямсона-Холла, [3]. Общее уширение дифракционных пиков состоит из уширения от микродеформаций $\beta_\varepsilon$ и уширения от размера кристаллитов $\beta_D$:

$$\beta_{tot} = \beta_\varepsilon + \beta_D = 4\varepsilon\tan\theta + \frac{K\lambda}{D\,\cos\theta} \qquad (3)$$

Умножим получившееся выражение на cos(θ):

$$\beta_{tot}\cos\theta = 4\varepsilon\,sin\,\theta + \frac{K\lambda}{D} \qquad (4)$$

Сравним выражение (4) со стандартным уравнением прямой $y = ax + b$. Видно, что если построить зависимость $\beta_{tot}\cos\theta$ от $sin\,\theta$ для всех пиков, то вклад микронапряжений ε определяемся из коэффициента наклона прямой $\varepsilon = a/4$, а вклад от малого размера областей когерентного из начальной ординаты $D = K\lambda/b$.

Результаты вычислений для бората железа, бората галлия и бората индия приведены в таблице.

| Образец | $\beta_2/\beta_1$ | $\tan\theta_2/\tan\theta_1$ | $sec\,\theta_2/\sec\theta_1$ | Размер кристаллитов D, нм | Величина микронапряжений ε, $10^{-5}$ |
|---|---|---|---|---|---|
| $FeBO_3$ | 1,10 | 2,18 | 1,09 | 159±8.4 | - |
| $InBO_3$ | 2,02 | 2,29 | 1,15 | 333.4±13.7 | 77.25±3.18 |
| $GaBO_3$ | 1,54 | 2,78 | 1,40 | 56.9±3.4 | - |

Видно, что в кристаллах бората индия существенный вклад в уширение дифракционных пиков вносят микронапряжения, которые могут возникать из-за несовершенств кристаллах, таких как дислокации, дефекты упаковки, когерентные напряжения, деформации, возникающие в процессе спекания. Т.о., в исследованных кристаллах $FeBO_3$ и $GaBO_3$ преобладают размерные, а в $InBO_3$ – напряженные эффекты.

Результаты исследований могут быть полезны при синтезе нанопорошков боратов индия, железа и галлия.

Список публикаций:

*[1] N. H. Andersen, M. Eldrup, N. Hansen, D. J. Jensen, T. Leffers, H. Lilholt, O. B. Pedersen, B. N. Singh, // Roskilde, Denmark: Risø National Laboratory. 1984. pp. 153-168.*

*[2] Zamkovskaya A., Maksimova E., Nauhatsky I. // J. Phys.: Conf. Ser. 1135 012020. 2018*

*[3] Williamson G. K., Hall W. H. // Acta Met. 1953. pp. 22-31*

# Оценка фрактальной размерности сформированных структур серебра на поверхности стеклообразных ионных проводников системы $AgGe_{1+x}As_{1-x}(S+УНТ)_3$, содержащих одностенные углеродные нанотрубки

***Игнатова Кристина Игоревна***

***Мельникова Нина Владимировна, Слаутин Борис Николаевич***

*Уральский федеральный университет имени первого президента России Б.Н. Ельцина*

*Мельникова Нина Владимировна, к.ф.-м.н.*

christinaignatova@gmail.com

Стеклообразные халькогениды из системы Ag-Ge-As-S, а также их композиты $AgGe_{1+x}As_{1-x}(S+CNT)_3$, содержащие одностенные углеродные нанотрубки (УНТ или CNT - carbon nanotubes) обладают уникальным комплексом свойств, например: высокой долей ионной проводимости (более 0.99) по ионам Ag+. Применение моделей, справедливых для однородной среды, позволило провести оценку динамики ионов в однородных стеклах системы из системы Ag-Ge-As-S [1]. В связи с этим они являются актуальными объектами исследований, и особый интерес представляют их транспортные свойства.

Цель данной работы: изучение и анализ сформированных фрактальных структур серебра на поверхности стеклообразных ионпроводящих халькогенидов $AgGe_{1+x}As_{1-x}(S+CNT)_3$, содержащих углеродные нанотрубки.

Синтез, аттестация и атомная структура материалов подробно описаны в [2-4] Для исследования топографии поверхности проводящих образцов и формирования фрактальных структур серебра на поверхности материалов под действием электрического поля зонда был использован сканирующий зондовый микроскоп (СЗМ) NTEGRA Aura.

Для фрактального анализа были выбраны кластеры серебра (один из таких кластеров представлен на *рис.1)*, которые можно рассматривать как двумерные плоские структуры, так как отношение размеров (высота/радиус) в них достаточно мало. Оценка фрактальной размерности Минковского была осуществлена с помощью традиционного клеточного метода вычисления фрактальной размерности [7]. Рассчитанное значение фрактальной размерности составляет 1.7, что характерно для кластерных фракталов.

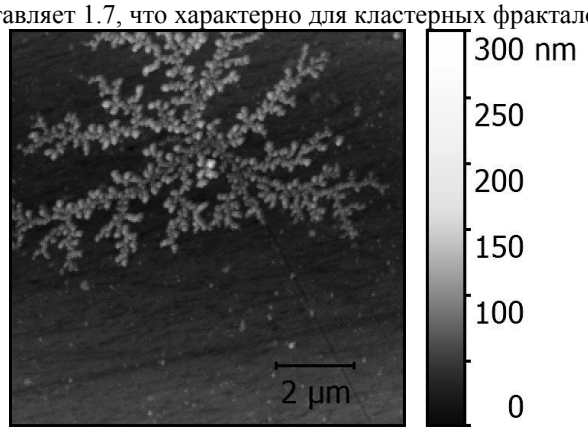



*рис.1. Сформированная под действием электрического поля зонда структура на поверхности $AgGe_{1+x}As_{1-x}(S+CNT)_3$ (x=0.4).*

Таким образом, в ходе проведенного фрактально-размерного анализа было найдено значение фрактальной размерности Минковского, которое хорошо согласуется с ранее полученными значениями фрактальных размерностей для массовых фракталов. В следствие этого, можно сделать вывод, что структура серебра, выращенная зондом, является масштабно-инвариантной в определенном диапазоне масштабов, то есть является фрактальной структурой. Показано, что исследуемый класс материалов может быть использован для литографии. Таким образом, учитывая уникальные свойства исследуемых материалов, например: наличие ионной проводимости, возможность применения их в качестве резистивных материалов [5-6], они имеют высокий потенциал практического применения и могут иметь прикладное значение в качестве многофункциональных материалов.

Список публикаций:

*[1] Мельникова Н.В., Абрамова В.В. // Труды симпозиума ОМА 20., Фонд науки и образования. 2017. Т. 1. №20. С. 165-168*

*[2] Melnikova N. V., Kurochka K. V., Kheifets O. L., Kadyrova N. I., Volkova Ya. Yu. // Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics. 2015.V. 79. pp. 719–722.*

*[3] Kurochka K.V., Melnikova N.V. // Solid State Ionics. 2017. V. 300. pp. 53-59.*

*[4] Kheifets O.L., Shakirov E.F., Melnikova N.V., Filippov A.L., Nugaeva L.L. // Semiconductors. 2012. V. 46. pp. 943-947.*

*[5] Мельникова Н.В. и др. Пат. 2614738 РФ, опубл. 29.03.2017, Бюл. №10*

*[6] Мельникова Н.В. и др. Пат. 2614942 РФ, опубл. 31.03.2017, Бюл. №10*

*[7] Р. М. Кроновер. // Фракталы и хаос в динамических системах. Основы теории. М. 2000. — 352 с.*

# Исследование локальной атомной структуры меди в процессе твердофазного синтеза CuMOR

***Каптелинин Святослав Юрьевич***

***Дурыманов Вениамин Александрович, Срабионян Василий Валерьевич, Базовая София Вадимовна, Авакян Леон Александрович, Бугаев Лусеген Арменакович***

*Южный федеральный университет*

*Срабионян Василий Валерьевич*

kaptelinin@sfedu.ru

В настоящее время исследование функциональных материалов, применяемых для превращения метана в метанол представляет как практический [1], так и фундаментальный интерес [2]. Поскольку эти материалы представляют из себя возобновляемый источник спирта, они вызывают колоссальный спрос в промышленности. Также они интересны и в рамках исследования химических реакций, таких как окисление метана. В качестве подобных материалов часто применяются медьсодержащие цеолиты различных структур. Для достижения максимальной эффективности выхода метанола необходимо четкое понимание процесса самой реакции. В работе [3] показано, что выход метанола зависит от содержания меди (I) и меди (II), которая является катализатором реакции. Количество же меди различной валентности зависит как от структуры самого изначального цеолита, так и способа загрузки меди в структуру цеолита, а также от механизма активации центров меди. Наиболее простым способом загрузки меди в цеолит является ионный обмен с CuCl: ионы меди замещают собой водород в структуре цеолита. Авторы работы [3] получили четкую связь выхода метанола в зависимости от того, твердофазным или жидкофазным ионным обменом была загружена медь в структуру цеолита (рис. 1). Нашей задачей является исследование локальной атомной структуры меди в составе цеолита, поскольку расположение меди неэквивалентных позициях прямо влияет на содержание меди (I) и меди (II) в образце. В настоящей работе проводилось in situ исследование твердофазного синтеза цеолита. В качестве метода исследования была выбрана спектроскопия рентгеновского поглощения, или XAS. Таким образом, у нас имеется температурная зависимость спектров поглощения K-края меди. В работе выполнен количественный анализ спектров меди с использованием кумулянтного разложения. Были проанализированы температурные изменения как в структуре CuCl, так и температурная эволюция активных центров меди непосредственно в структуре цеолита.

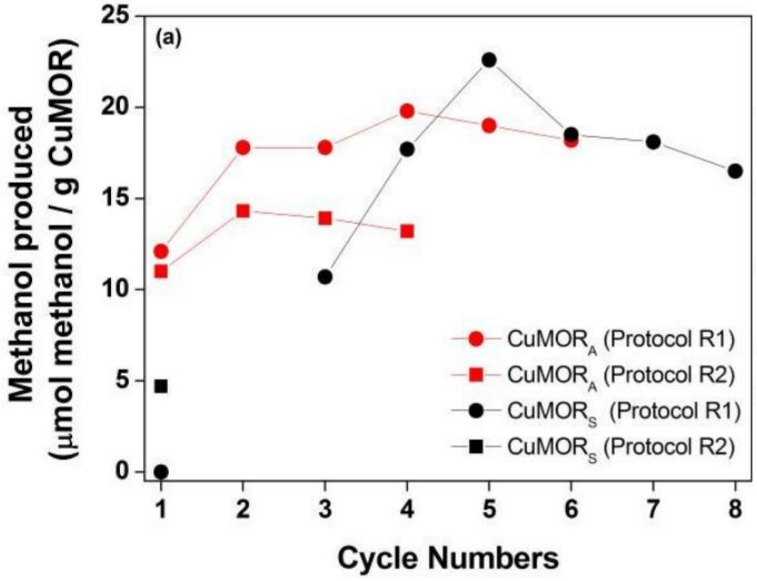



*рис.1. Зависимость выхода метанола (мк моль/г. цеолита) от количества циклов активации для твердофазного (черная кривая) и жидкофазного синтеза (красные кривые) соответственно [3].*

Работа выполнена при поддержке РНФ по проекту № 18-72- 00096 «Изменения атомной и электронной структуры активных центров меди в Cu-цеолитах и их каталитическая активность в ходе реакций окисления метана до метанола».

Список публикаций:

*[1] Patrick Tomkins, Ali Mansouri, Dr. Selmi E. Bozbag et. al //A Journal of the German Chemical Society. 2016. V. 55. I. 18. pp. 5467-5471.*

*[2] Zhong Li, Kechang Xie, Robert C.T. Slade // Applied Catalysis A: General. 2001. V 209. I. 1-2. pp. 107-115.*

*[3] Selmi E. Bozbag, Evalyn Mae C. Alayon, Jeroen A. van Bokhoven et. al // Catalysis Science & Technology. 2016 V. 6. I. 13. pp. 5011-5022*

## Плоский туннельный полевой транзистор на основе графена

***Катков Всеволод Леонидович***
*Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова*
*Объединенный институт ядерных исследований*
katkov@theor.jinr.ru

Методом функций Грина [1] в рамках приближения сильной связи рассчитан туннельный ток в контакте, состоящем из полуплоскостей графена и двуслойного графена с двумя возможными типами упаковки в двух возможных ориентациях кристаллической решетки. Показано, что зонная структура графена, ориентированного краем типа “кресло”, приводит к специфической для каждого из графенов степенной зависимости туннельного тока от напряжения, характер которой определяется изменением числа транспортных каналов при изменении напряжения. Обнаружено, что при встречной ориентации краем типа “зигзаг” для всех видов рассмотренных контактов туннельный ток содержит характерные пики, обусловленные влиянием локализованных краевых состояний. Исследован эффект влияния затвора. Показано, что в случае структур с краем зигзаг имеет место эффект “включения/выключения” контактов. Контакты же на графенах с краем “кресло” не обладают выраженным “переключающим” свойством, а увеличение напряжения на затворе приводит к увеличению проводимости. В соответствии с этим была предложена схема нового переключающего устройства - плоского туннельного полевого транзистора, переключающая способность которого связана с возможностью манипулирования областью с высокой плотностью состояний на краю "зигзаг" относительно положения транспортного окна [2-4]. Для подтверждения устойчивости данного прибора к появлению краевых вакансий были исследовано влияния распределений и концентраций краевых вакансий на "топологически защищенные" электронные краевые состояния и туннельный ток в устройстве [5, 6].

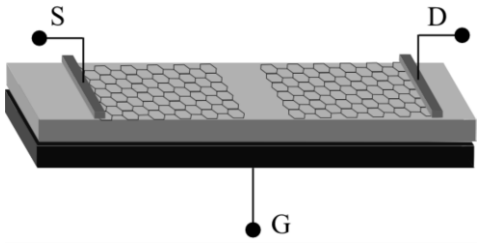



*рис.1. Схематическое изображение транзистора*

Список публикаций:
*[1] Katkov V.L. and Osipov V.A. // J. Vac. Sci. Technol. B. 2017. Vol. 35. 050801.*
*[2] Katkov V.L. and Osipov V.A. // Appl. Phys. Lett. 2014. Vol. 104. 053102.*
*[3] Катков В.Л, Осипов В.А. // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 98. С.782.*
*[4] Катков В.Л, Осипов В.А. //Официальный бюллетень «Изобретения. Полезные модели». 2015. Т. 18. 2 554 694.*
*[5] Glebov A.A., Katkov V.L. and Osipov V.A// JETP Letters. 2016. Vol. 104. p.842.*
*[6] Glebov A.A., Katkov V.L. and Osipov V.A// Europhys. Lett. 2017. Vol. 118. 27003.*

## Исследование эффективности генерации иттербиевого лазера от длины волокна

***Кашина Раъно Рустамовна***
***Рахматуллина Алина Римовна***
*Пермский государственный национальный исследовательский университет*
*Пермская научно-производственная приборостроительная компания*
*Азанова Ирина Сергеевна*
ranoxan13@gmail.com

Оптические волокна (ОВ), легированные ионами иттербия, являются самой популярной средой при создании мощных и энергетически эффективных источников лазерного излучения, благодаря особенной структуре энергетических уровней (рис. 1).

Данная система уровней ведет себя как квазичетырехуровневая с относительно большим временем жизни метастабильного уровня. Квантовый дефект между длинами волн накачки и излучения ионов иттербия

мал, кооперативные эффекты незначительны [1]. Таким образом, иттербий по своей природе обладает высокой эффективностью с оптико-оптической эффективностью преобразования излучения более 70%.

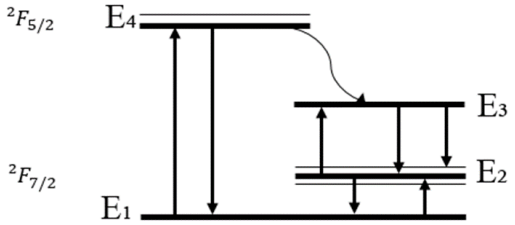



*рис.1. Структура энергетических уровней ионов иттербия*

Эффективное применение иттербиевых волокон при накачке в оболочку оказывается возможным благодаря высокому сечению поглощения на длинах волн накачки. В спектральной области λ> 1050 нм сечение люминесценции сильно превышает сечение поглощения, что делает возможным получение лазерной генерации при относительно низкой заселенности верхнего уровня.

При конструировании мощных лазеров [2,3] используют ОВ с накачкой в оболочку, то есть излучение от диодов накачки вводится в оболочку активного световода, и при прохождении через сердцевину это излучение поглощается ионами редкоземельных элементов (РЗЭ). Одним из способов накачки в оболочку является использование световодов с многоэлементной первой оболочкой, или GT-Wave (Gradually Transferred Wave).

Волокна с многоэлементной первой оболочкой имеют ряд преимуществ:

Уменьшение тепловой нагрузки на волокно, так как накачка заводится не с торца активного волокна, а в пассивное волокно, находящееся в оптическом контакте с активным волокном [4];

Упрощение оптической схемы лазера или усилителя, из-за нескольких входных портов для накачки [5];

Упрощение схемы за счет стандартной конструкции жил, которые можно сваривать со стандартными компонентами для оптической схемы.

В данной работе представлены результаты по исследованию эффективности генерации непрерывного волоконного иттербиевого лазера в широком спектральном диапазоне от 1066 нм до 1153 нм. Для получения высокой выходной мощности излучения в качестве активной среды лазера было использовано иттербиевое волокно с многоэлементной первой оболочкой GT-Wave, позволяющее вводить высокую мощность излучения от многомодового лазерного диода накачки в оболочку и сохранять при этом полностью волоконное исполнение схемы. Исследование выполнено для длин активного волокна от 20 до 30 м. Максимальная эффективность 71% (рис.2) получена при длине активного волокна 30 м на длине волны 1080 нм, соответствующей пику люминесценции ионов иттербия.

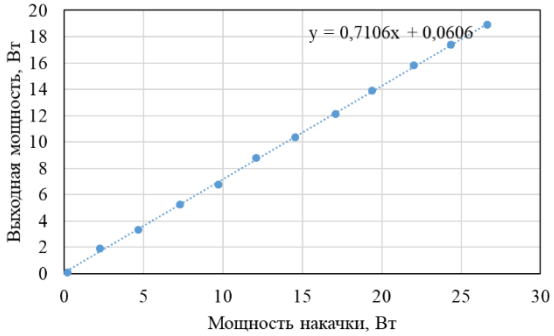



*рис.2. Зависимость выходной мощности от мощности накачки при длине волны генерации 1080 нм и длине резонатора 30 м*

Дифференциальная эффективность во всем диапазоне длин волн от 1066 нм до 1125 нм при данной длине волокна составила более 40% (рис.3). При сокращении длины активного световода до 20 м эффективность генерации на длине волны 1066 нм увеличилась от 40 до 60%, тогда как на остальных длинах волн эффективность генерации понизилась. Таким образом, показано, что для повышения эффективности генерации в коротковолновом диапазоне необходимо сокращать длину активной среды, тогда как для высокой эффективности генерации в длинноволновом диапазоне необходимо увеличивать длину активной среды.

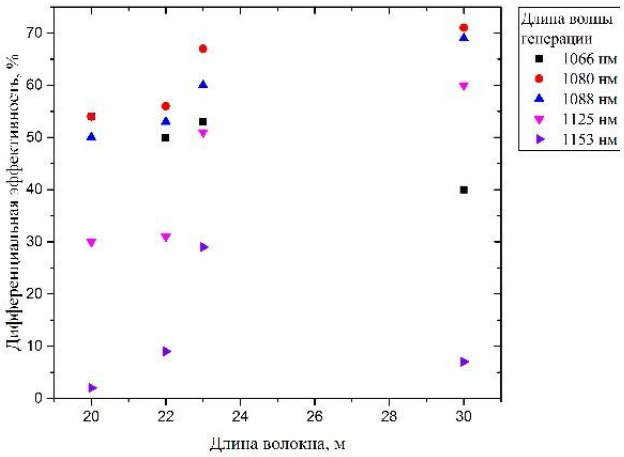



*рис.3. Зависимость эффективности лазера от длины волны генерации*

Список публикаций:
*[1] Мелькумов М.А., Буфетов И.А., Кравцов К.С., Шубин А.В., Дианов Е.М. // Сечения поглощения и вынужденного излучения ионов Yb3+ в силикатных световодах, легированных P2O5 и Al2O3. Препринт № 5, Москва, РАН Научный Центр Волоконной Оптики при Институте Общей Физики РАН им. А.М. Прохорова. 2004. С. 58*
*[2] Zhihe Huang, Jianqiu Cao, Shaofeng Guo, Jinbao Chen, Xiaojun Xu, Jinyong Leng // Model of distributed side-coupled cladding-pumped fiber lasers. Advanced Solid-State Lasers Congress Technical Digest. OSA 2013*
*[3] Yingboo Chu, Yu Yang, Yunxiu Ma, Negli Dai, Jinyan Li, Luyun Yang // Yb3+ doped large core silica fiber based on glass phase – separation technology. Workshop on Specialty Optical Fibers and Their Applications. OSA 2015*
*[4] Буров Н.В., Лин Дж., Ромашова В.Б. // Высокомощные волоконные объединители. https://oessp.ru,Санкт-Петербург 2018*
*[5] Курков А.С. // Волоконные лазеры: принципы построения и основные свойства. Шолохов Е.М. и др. Ульяновск: издательский центр УлГУ, Ульяновск УлГУ, 2012.*

## Исследование модифицированной ионными пучками керамики $Al_2O_3$ методом сканирующей электронной микроскопии

***Костенко Валерия***
*Национальный исследовательский Томский политехнический университет*
*Гынгазов Сергей Анатольевич, д.т.н.*
kostenkova@tpu.ru

При производстве материалов электронной техники, материалов функционального и инструментального назначений часто возникает потребность создавать структуры с градиентными свойствами. Одним из направлений создания таких структур являются методы радиационной обработки. Среди них широкое распространение получил метод модифицирования мощными импульсными ионными пучками (МИИП) [1-3]. В результате таких воздействий происходит модификация поверхности, что проявляется в изменении фазового и химического состава приповерхностного слоя, структурировании поверхности в виде рекристаллизации зерен [4].

Особую роль в микроэлектронике играет корундовая керамика, которая наиболее широко используется как подложечный материал. Алюмооксидная керамика обладает повышенной твердостью, устойчивостью фазового состава и характеризуется высокими диэлектрическими характеристиками. Представляет интерес управления структурой и свойствами данного типа керамики методами ионной обработки. Целью работы являлось исследование влияния поверхностной обработки посредством МИИП на структурные преобразования модифицированных слоев алюмооксидной керамики.

Методика эксперимента. Керамика представляла собой образцы размером 1×1см толщиной 0.52 мм. Ионное облучение образцов проводилось с помощью импульсного ускорителя ТЕМР-4М [5]. Состав ионов пучка - ионов углерода ($C^+$,) и протонов ($H^+$) в соотношении 85%/15%. Величина ускоряющего напряжения, измеренная делителем напряжения, составляла 180 кэВ, длительность импульса составляла 100 нс. Плотность ионного тока составляла 15 А/см$^2$, 50 А/см$^2$ и 85 А/см$^2$. Плотность энергии в импульсе составляла W=0.3, 1.0 и 1.5 Дж/см$^2$, соответственно. Воздействие ионной обработки исследовалось в зависимости от плотности ионного тока и энергии, осажденной на поверхности материала, которая была установлена количеством импульсов N. Количество импульсов изменялось от 3 до 300.

Исследование модификации структуры поверхности алюмооксидной керамики проводились на сканирующем электронном микроскопе Hitachi-TM 3000 с разрешающей способностью 30 нм. Результаты электронно-микроскопического исследования представлены на *(рис. 1, 2).*

На (*рис. 1 a)* представлено SEM изображение поверхности образца корундовой керамики не подвергнутого радиационной обработке. На поверхности можно увидеть зернистую структуру керамики. На изображении хорошо видны поры, распределенные случайным образом по поверхности. Воздействие МИИП приводит к изменению микроструктуры поверхности. Поверхность обработанной керамики имеет мозаичную структуру (*рис. 1 b*) в виде отдельных блоков, разделенных микротрещинами. Средний размер блоков составляет 10-15 мкм. Образование трещин обусловлено низкой теплопроводностью материала и режимами тепловой обработки. На поверхности можно заметить следы оплавления.

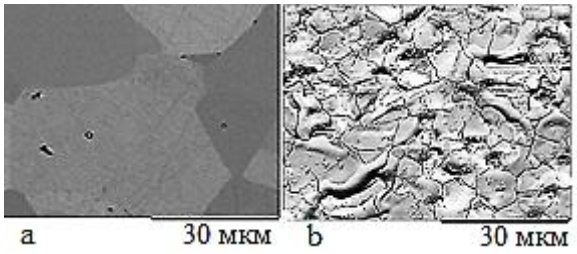



*рис.1. Вид сверху алюмооксидной керамики: a – до ионной обработки;*
*b – после ионной обработки при j=85 А/см$^2$, W=1.5 Дж/см$^2$*

На (*рис.2)* представлено изображение поперечного скола керамических образцов, подвергнутых воздействию МИИП. Обработка МИИП при плотности тока ионного пучка 15А/см$^2$ не приводит к заметному изменению приповерхностных слоев керамики (*рис.2 a*). На (*рис.2 b*) показано, что зона модифицирования составляет 6-8 μm. На некоторых участках этой зоны наблюдается микроструктура «столбчатого типа», формы зерен в приповерхностных слоях ориентированы по направлению к обрабатываемой поверхности. Образованные трещины, в процессе обработки МИИП, распространены на всю глубину оплавленного слоя (*рис.2 c*). С увеличением плотности ионного тока микроструктура «столбчатого типа» не наблюдается. Толщина оплавленного слоя составляет 9-11 мкм.

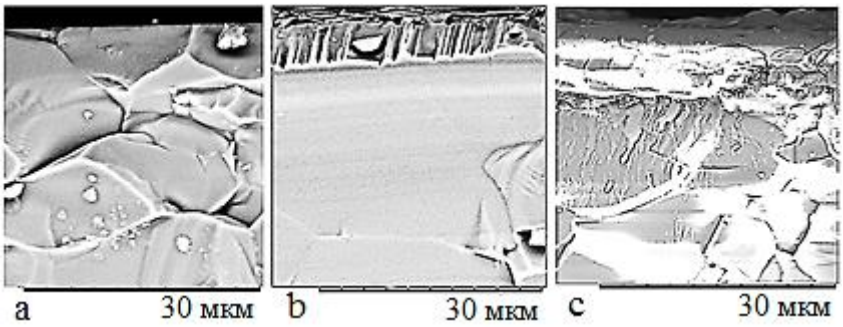



*рис.2. Поперечный скол модифицированной керамики МИИП: a – j=15 А/см$^2$, W=0.3 Дж/см$^2$;*
*b – j=50 А/см$^2$, W=1 Дж/см$^2$; c - j=85 А/см$^2$, W=1.5 Дж/см$^2$*

Таким образом, установлено, что воздействие МИИП углерода приводит к изменению микроструктуры приповерхностных слоев керамики. Ионная обработка позволяет создать керамику с градиентной структурой. Обнаруженные эффекты позволяют управлять механическими свойствами оксидных керамических материалов.

Список публикаций:

*[1] Schmidt B., Wetzig K. // Springer Verlag: Germany. 2013. 424 p.*
*[2] Ghyngazov S. A. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B. 2018. V. 435. P. 190.*
*[3] Зацепин Д. А., Чолах С. О., Вайнштейн И. А. // Учебник: Екатеринбург: ГОУ ВПО УРФУ. 2014. 106 С.*
*[4] Ghyngazov S. A., Vasil'ev I. P., Surzhikov A. P., Frangulyan T. S., Chernyavskii A. V. // Technical Physics. 2015. no 60. P. 128.*
*[5] Davis H. A., Remnev G. E., Stinnett B. W., Yatsui K. // MRS Bulletin. 1996. 21(8). P. 58-62.*

# Влияние ионного облучения на фазовую перестройку керамики $ZrO_2$-$3Y_2O_3$

***Костенко Валерия***
*Национальный исследовательский Томский политехнический университет*
*Гынгазов Сергей Анатольевич, д.т.н.*
kostenkova@tpu.ru

Тенденция развития современной техники предполагает создание особо прочных материалов, а так же улучшение функциональных свойств уже имеющихся структур. Диоксид циркония обладает комплексом многофункциональных свойств, что делает его перспективным материалом для использования в разных отраслях промышленности. Области применения циркониевой керамики могут быть значительно расширены путем создания методами модификации на ее основе керамических структур с градиентными свойствами.

Для модификации керамических материалов перспективно использовать радиационные методы обработки [1, 2]. Известно, что структурное и фазовое состояния керамики из частично стабилизированного диоксида циркония влияют на ее механические свойства. Ионное облучение является одним из перспективных методов обработки материалов с целью изменения их эксплуатационных свойств. В работе [2] приведены результаты ионного облучения керамики из диоксида циркония мощными импульсными пучками, воздействие которых приводит к структурной и фазовой перестройке керамики. Такая перестройка приводит к изменению механических свойств керамики в приповерхностном слое. Применение такого вида ионного воздействия приводит к созданию керамики с градиентными свойствами и может расширить область ее применения.

Воздействие ионного облучения в постоянном режиме широко применяется для модификации металлов и сплавов. При этом наблюдается изменением их свойств, в частности, упрочнение. Представляет интерес изучение возможностей ионного модифицирования для управления структурой и свойствами керамических материалов, в том числе циркониевой керамики.

Целью работы являлось исследование влияния облучения непрерывными ионными пучками аргона на фазовую перестройку керамики из диоксида циркония.

Объектом исследования являлась керамика из частично стабилизированного диоксида циркония состава $ZrO_2$-$3Y_2O_3$. Образцы были изготовлены в виде таблеток с геометрическими размерами - диаметр 9 мм, толщина 3 мм. Образцы спекались в высокотемпературной муфельной печи СНОЛ 12/16 при температуре 1400°С в течение 1 часа. После спекания керамические образцы подвергались механической обработке в два этапа с использованием абразивного порошка из $Al_2O_3$ с размерами зерен 15 – 20 мкм и 3 - 5 мкм. Далее образцы подвергались полировке алмазной пастой с размером зерен порядка 0,5 - 1 мкм. Готовые керамические образцы подвергались ионному облучению.

Облучение керамических образцов проводили на ионном имплантере ИЛМ-1, оснащенном ионным источником «Пульсар-1М» [3]. Облучение проводили ионами аргона с энергией 30 кэВ. Плотность тока ионного пучка во время облучения составляла 300 мкА/см$^2$. В ходе облучения флюенс ионов варьировался от $10^{16}$ до $10^{18}$ см$^{-2}$.

Исследование структуры поверхности керамики $ZrO_2$-$3Y_2O_3$ проводились на сканирующем электронном микроскопе Hitachi-TM 3000 с разрешающей способностью 30 нм. Результаты электронно-микроскопического исследования керамики $ZrO_2$-$3Y_2O_3$ представлены на *(рис. 1)*.

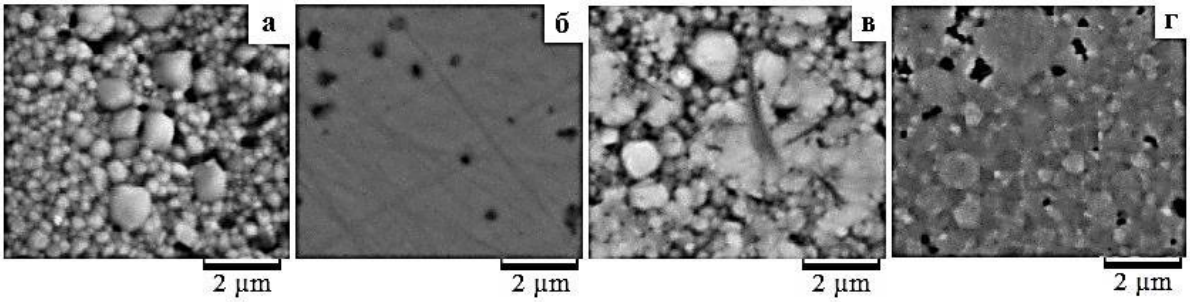



*рис.1. Поверхность керамики: а – после спекания; б – после полировки; в, г – после ионного облучения f = 2,4·10$^{16}$ см$^{-2}$ и f = 10$^{18}$ см$^{-2}$ соответственно*

Из *(рис. 1 а)* видно, что микроструктура спеченной керамики характеризуется межзеренными границами и наличием пор. После обработки алмазной пастой образцы приобретают «зеркальную» поверхность *(рис. 1 б)*, на которой видны поры и дефекты в виде царапин. Во время облучения образцов флюенсом 2,4·10$^{16}$ см$^{-2}$ наибольшее воздействие ионный пучок оказывает на места скопления пор, в результате чего в этих местах наблюдается выявление исходной зернённой структура керамики *(рис. 1 в)*. В местах, где отсутствуют поры,

выявление зернёной структуры не наблюдали. Во время облучения керамики флюенсом $10^{18}$ $см^{-2}$ наблюдается выявление зернёной структуры по всей поверхности образца *(рис. 1 г)*.

Известно, что радиационные методы обработки материалов сопровождаются фазовой перестройкой [4]. Фазовый анализ керамических образцов проводился с помощью рентгеновского дифрактометра ARL X'tra, с использованием программного комплекса Powder Cell 2.4. На дифрактограммах керамики в исходном состоянии (после спекания) и после ионного облучения непрерывными ионными пучками наблюдался набор основных рефлексов, которые соответствовали основной тетрагональной фазе t-$ZrO_2$ *(рис. 2)*.

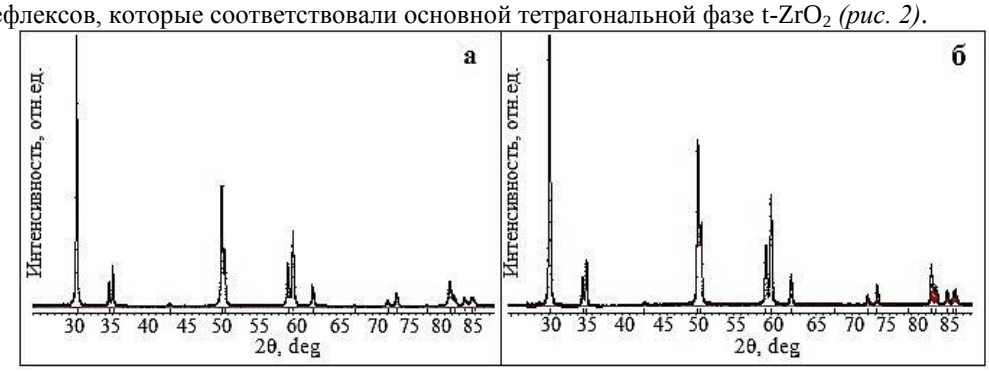



*рис.2. Дифрактограммы образцов циркониевой керамики до (а) и после (б) ионного облучения*

Согласно результатам рентгенофазового анализа ионное облучение керамики не вызывает существенного изменения размеров области когерентного рассеяния L (OKP) и микроискажений решетки Δd/d.

Таким образом, облучение непрерывными пучками ионов аргона с энергией 30 кэВ, плотностью тока 300 $мкА/см^2$ и флюенсом от $10^{16}$ до $10^{18}$ $см^{-2}$ не приводит к фазовой перестройке керамики из частично стабилизированного диоксида циркония.

Список публикаций:

*[1] Elke W., Werner W. // Springer Series Surface Sciences. 2016. V. 61.*
*[2] Ghyngazov S. A. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B. 2018. V. 435. P. 190.*
*[3] Гаврилов Н. В., Никулин С. П., Радковский Г. В. // Приборы и техника эксперимента. 1996. №1. С. 93.*
*[4] Ghyngazov S. A., Vasil'ev I. P., Surzhikov A. P., Frangulyan T. S., Chernyavskii A. V. // Technical Physics. 2015. no 60. P. 128.*

## Моделирование движения частицы в наклонной плоскости под действием потока воды

***Куличкина Туяра Петровна***
*Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова*
*Яковлев Борис Васильевич, д.ф.-м.н.*
turaret_2017@mail.ru

При усовершенствовании устройств обогащения полезных ископаемых или проектировании новых устройств необходимо знать их параметры при различных режимах работы. Для оптимизации этих параметров разрабатываются математические модели процессов сепарации в устройствах гравитационного обогащения. Одним из современных методов при математическом моделировании процессов обогащения и сепарации является использование теории стохастических процессов [1]. При разработке математических моделей коллективного движения частиц появляются задачи определения вероятности положения одной частицы в устройстве. Целью данной работы является определение вероятности положения частицы на наклонной плоскости, которая движется под действием изотропного потока воды исходящего из одного нижнего угла наклонной прямоугольной плоскости. В зависимости от начального положения, массы и размеров частицы, от скорости потока воды, угла наклона плоскости частица упадет на нижнюю часть плоскости на определенном расстоянии от начала координат (точки откуда истекает поток жидкости). Такое устройство является простейшим элементом более сложных устройств гравитационной сепарации полезных ископаемых. Для достижения указанной цели необходимо решать следующие задачи:

1. Разработка математической модели наклонной прямоугольной плоскости с изотропным потоком идеальной жидкости.
2. Разработка математической модели движения частицы по рабочей поверхности устройства.
3. Разработка математической модели движения изотропного потока невзаимодействующих частиц. Определение возможных положений частиц за равные определенные промежутки времени и создания множества возможных состояний системы.

4. Определение вероятности положения частицы на наклонной плоскости, используя метод Гиббса.

Исследования проведены методами математического моделирования и натурного эксперимента. В настоящей работе разработана математическая модель изотропного потока идеальной жидкости на наклонной плоскости, которая включает уравнения непрерывности и уравнение Эйлера. Разработана математическая модель движения частицы, которая движется под действием потока жидкости и силы тяжести по наклонной плоскости. Получено обыкновенное дифференциальное уравнение движения второго порядка:

$$m\ddot{\mathbf{R}} = \mathbf{F_v} + m\mathbf{g} + \mathbf{F_f} + \mathbf{N} \qquad (1)$$

где $\mathbf{R}$ – радиус вектор тела, $m$ – его масса, $\mathbf{F_v} = a(\mathbf{u} - \mathbf{v})$ – сила действия потока воды, $a$ – коэффициент сопротивления при движении тела в среде, зависящая от характеристики среды, формы и свойств тела, $\mathbf{u}$ – скорость потока воды, $\mathbf{v}$ –скорость движения тела, $\mathbf{g} = g\mathbf{e_z}$ – ускорение свободного падения, $\mathbf{F_f} = Nf\frac{\mathbf{v}}{v}$ – сила трения о поверхность, $\mathbf{N} = -mg\sin\beta\cos\beta\,\mathbf{e_y} + mg\cos^2\beta\,\mathbf{e_z}$ – сила реакции поверхности, β – угол наклона плоскости устройства. Скорость потока воды уменьшается с расстоянием от точки истока. Согласно уравнению непрерывности для несжимаемой жидкости $\operatorname{div}\mathbf{v} = 0$. Отсюда следует уравнение баланса потоков $\mathbf{S_1}\cdot\mathbf{v_1} = \mathbf{S_2}\cdot\mathbf{v_2}$, что приводит изменению скорости потока воды по закону $\mathbf{u} = u_0 r_0 \frac{1}{r}\mathbf{e_r}$. В результате решения уравнения (1) методом Рунге-Кутты 4-го порядка получены закон движения и траектория частицы (рис.1). Для определения множества возможных положений частицы использован метод ансамблей Гиббса [2], согласно которому состояние системы в каждый момент времени рассматривается как элемент некоторого пространства состояний. Рассматривается движение первоначально изотропного потока невзаимодействующих частиц в изотропном потоке идеальной жидкости. Начальные параметры зависят от начального значения распределения вероятностей. Изотропность потока частиц в начальный момент времени означает произвольное направление начальной скорости частицы, т.е. равномерное по всем направлениям распределение вероятности начальной скорости частицы. Теоретически получено множество возможных положений частиц, концентрация которых определяет вероятность местоположения частицы на наклонной поверхности. При определении концентрации возможных положений частиц использован численный метод. Полученные результаты представлены в виде графиков. Проведены целенаправленные натурные эксперименты. Результаты экспериментальных исследований показали достаточно хорошее соответствие теоретических результатов математической модели с данными эксперимента.

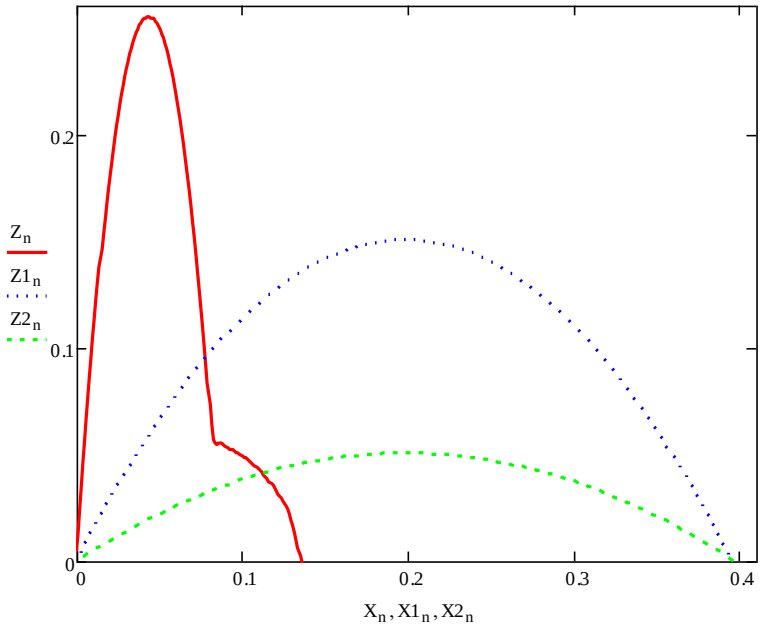



*рис.1 Траектории частиц на плоскости в зависимости от направлений начальной скорости частицы (красная линия $87^0$, синяя – $60^0$, зеленая – $30^0$).*

Список публикаций:

*[1] Слепцова Е.С., Никифорова Л.В., Яковлев Б.В., Матвеев А.И. Математическон моделирование процесса концентрации тяжелых частиц в постели отсадолчной машины // Горный информационно-аналитический бюллетень. — 2014. — № 10. — С. 239—245.*

*[2] S. R. Krylatova, B. V. Yakovlev. Modeling by Gibbs method of processes in equipment for enrichment and separation of mineral resources //AIP Conference Proceedings 2041, 050004 (2018).*

# Пьезорезистивные свойства дираковских структур

***Лебедева Ольга Сергеевна***

***Лебедев Николай Геннадьевич[1], Ляпкосова Ирина Александровна[2]***

*[1]Волгоградский государственный университет*

*[2]Волгоградский аграрный университет*

*lebedeva_os@volsu.ru*

С открытием и изучением физических свойств двумерной формы углерода – графена [1], обладающего линейным законом дисперсии вблизи уровня Ферми, сформировался новый класс материалов, названных дираковскими структурами. В 2010 г. впервые синтезирован родственный графену материал – силицен, представляющий собой двумерный слой из атомов кремния, составляющих две гексагональные подрешетки, смещенные друг относительно друга [2]. Он привлекает большое внимание в связи с перспективами практического применения в кремниевой электронике и спинтронике. В 2014 г. синтезирован еще один двумерный аналог графена, составленный из атомов германия – германен [3]. Запрещенная щель в германене (~24 мэВ) превосходит графеновую (<0.05 мэВ), что делает германен идеальным кандидатом для изучения квантового спинового эффекта Холла при допустимых температурах. Малая запрещенная щель германена поддается управлению электрическим полем, адсорбцией различных атомов, деформацией и взаимодействием с подложкой.

Стремительное и ускоряющееся развитие информационных технологий предполагает дальнейшее увеличение мощности вычислительных устройств, что стимулирует поиск новых энергосберегающих технологий обработки информации, одной из которых призвана стать недавно сформировавшаяся стрейнтроника [4]. Это новое научное направление в физике конденсированного состояния, использующие эффекты в твердых телах, обусловленные деформациями и приводящие к изменению зонной структуры, проводящих и магнитных свойств материалов. Подобные эффекты позволяют реализовать новое поколение устройств информационных и сенсорных технологий.

Одна из ветвей стрейнтроники связана с изучением влияния механических напряжений на электронные свойства исследуемого образца – пьезорезистивный эффект. Структурные деформации дираковских материалов также обуславливают изменение их проводимости. При этом происходит изменение ширины запрещенной зоны в зависимости от величины внешних механических воздействий, что открывает возможности их использования в приборах, работа которых основана на эффекте пьезосопротивления, таких как спиновый поляризатор, транзисторы, пьезосенсоры.

Взаимосвязь механических и электронных свойств таких дираковских структур, как германена и силицена остаются не исследованными, поэтому изучение возможностей управления их электронным строением путем деформации структуры представляется достаточно актуальным.

В работе представлены результаты теоретического исследования пьезорезистивных свойств дираковских структур на примере графеновых нанолент (ГНЛ) [1] различной геометрической конфигурации и ширины, содержащих донорные и акцепторные примеси. В рамках моделей Хаббарда с использованием метода сильной связи проведено моделирование зонной структуры деформированных нанолент. Деформированное состояние кристаллита в общем случае задается тензором дисторсии $u_{\alpha\beta} = \partial_\beta \left(\mathbf{r}' - \mathbf{r}\right)_\alpha$, ($\alpha$, $\beta$ = *x*, *y*, *z*), где **r** и **r**’ – радиус-векторы начального и конечного положения некоторой точки кристаллита.

Построена математическая модель зонной структуры деформированных примесных ГНЛ в рамках периодической модели Андерсона. Рассмотрены относительные деформации растяжения (сжатия) графеновых нанолент $\delta$ = ±0.035, ±0.069, ±0.104, 0.25 соответственно. Принципиальных качественных различий зонных структур по сравнению со спектром недеформированных лент не наблюдается. Акцепторные дефекты создают примесную зону вблизи уровня Ферми. Зона примесных состояний в случае донорных дефектов локализована вблизи уровня энергии электрона на дефекте -3.28 эВ. Количественный анализ показывает уменьшение (увеличение) плотности $\pi$-электронных состояний в случае растяжения (сжатия).

Исходя из определения тензора эластопроводимости его продольная компонента для одномерных структур может быть выражена следующей формулой:

$$M = \frac{\Delta\sigma}{\sigma_0}\frac{1}{\delta}, \qquad (1)$$

где $M$ – продольная компонента тензора 4-го ранга эластопроводимости, $\Delta\sigma = \sigma - \sigma_0$ – изменение продольной компоненты тензора удельной проводимости вследствие деформации кристаллита, $\sigma$ и $\sigma_0$ –

продольные компоненты $\sigma_{zz}$ тензора 2-го ранга удельной проводимости деформированного и недеформированного кристаллита соответственно.

Продольные компоненты *M* тензора эластопроводимости примесных ГНЛ разной ширины и геометрического типа рассчитаны в рамках модели Кубо-Гринвуда с использованием метода функций Грина. Анализ результатов расчета показал, что с ростом δ величина *M* возрастает (убывает) при растяжении (сжатии) для ГНЛ всех типов. А также возрастает монотонно при малых концентрациях акцепторных дефектов ($x = 10^{-5}$, $10^{-4}$, $10^{-3}$), но при $x = 10^{-2}$ наблюдается уменьшение величины пьезорезистивной константы. Кроме того, тензор эластопроводимости не зависит от концентрации донорных примесей.

Список публикаций:

*[1] Physics of graphene. By editors H. Aoki, M.S. Dresselhaus. Springer International Publishing Switzerland, 2014. 356 p.*
*[2] Герт А.В., Нестоклон М.О., Яссиевич И.Н. // ЖЭТФ. 2015. Т. 148. №. 1. С. 133.*
*[3] A. Acun, L. Zhang, P. Bampoulis, M. Farmanbar, A. Van Houselt, A.N. Rudenko, M. Lingenfelder, G. Brocks, B. Poelsema, M.I. Katsnelson, H.J.W. Zandvliet // J. Phys.: Condens. Matter 2015. V.27(443002).*
*[4] Бухараев А. А., Звездин А. К., Пяток А. П., Фетисов Ю. К. // УФН. 2018. Т. 188. № 12(12). С. 1288.*

## О переходных слоях в эпитаксиальных пленках ферритов-гранатов

***Луговской Назар Викторович***
***Семук Евгений Юрьевич, Тимченко Максим Юрьевич, Евтухова Екатерина Андреевна***
*Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт*
*Бержанский Владимир Наумович*
*lugovskoynv@cfuv.ru*

Эпитаксиальные пленки ферритов-гранатов (ЭПФГ) обладают уникальными магнитными и магнитооптическими свойствами и находят широкое применение в различных прикладных областях [1]. Одним из возможных применений таких пленок является магнитооптическая вихретоковая интроскопия, где они используются в качестве сенсоров для обнаружения дефектов. Визуализация дефектов основана на способности пленок менять свое магнитное состояние под действием вихревых магнитных полей, топология которых существенно искажается вблизи дефектов [2].

Эпитаксия - процесс ориентированного наращивания, в результате которого новая фаза продолжает кристаллическую решетку подложки с образованием переходного эпитаксиального слоя. Этот слой способствует когерентному срастанию двух кристаллических решеток по плоскостям и направлениям со сходной плотностью упаковки атомов [3].

Одним из самых сложных вариантов эпитаксии является гетероэпитаксия - процесс ориентированного наращивания одного вещества, отличающегося по составу от другого вещества. При кристаллизации на ориентированной монокристаллической подложке в условиях малых пересыщений осуществляется процесс эпитаксии, и структура пленки повторяет структуру подложки. Кинетика осаждения пленок определяется температурой и давлением исходной жидкой фазы, поверхностными энергиями образующихся границ раздела пленки с подложкой и окружающей средой.

В процессе эпитаксиального осаждения пленки на начальной стадии происходит образование некоторого переходного слоя между пленкой и подложкой, обладающего структурными и электрофизическими свойствами, отличными от свойств как пленки, так и подложки. Толщина переходного слоя и его свойства зависят от протекания процесса эпитаксии. Этот слой может включать большое количество структурных дефектов. Основными причинами образования дефектного переходного слоя являются: несовершенство механической обработки поверхности подложки и неполное химическое удаление нарушенного слоя; образование рельефа поверхности подложки при химическом или газовом травлении перед эпитаксией; загрязнение поверхности; захват атомов примесей поверхностью растущих зерен и ускоренная диффузия примесей из подложки в пленку [3,4].

В рамках выбора оптимального сенсора для вихретоковой магнитооптической дефектоскопии были исследованы 13 образцов эпитаксиальных висмутсодержащих пленок ферритов-гранатов с общей формулой $(R,Bi)_3(Fe, Me)_5O_{12}$ и различным типом магнитной кристаллографической анизотропии «легкая ось» и «легкая плоскость». Пленки синтезированы методом жидкофазной эпитаксии на прозрачных подложках из гадолиний-галлиевого граната. Девять образцов обладали магнитной кристаллографической анизотропии типа «легкая ось», четыре - «легкая плоскость». Измерение динамических свойств пленок производилось индуктивно-частотным методом и методом ФМР. Оба метода показали наличие во всех образцах подслоя. В качестве

примера на рисунке 1 показан спектр ФМР одного из образцов, содержащий две линии - основной сигнал (а) и сигнал от подслоя (б).

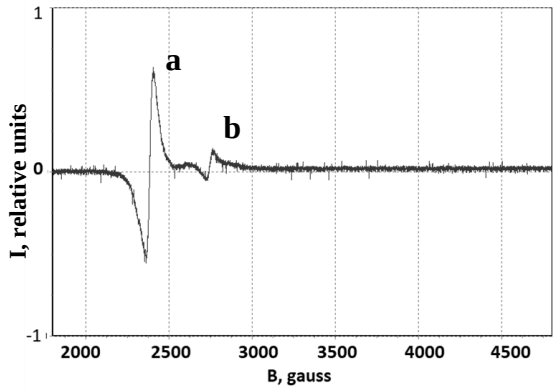



*рис.1 Спектр ФМР ЭПФГ с анизотропией «легкая ось»: a – сигнал от основного слоя, b-сигнал от подслоя.*

Было предположено что появление данных подслоев объясняется описанной выше природой образования переходного слоя между пленкой и подложкой.

Исследование ориентационных зависимостей резонансных полей при изменении направления приложенного магнитного поля относительно плоскости пленки показало, что в подслое, как правило, реализуется магнитная анизотропия типа «легкая плоскость» независимо от того, какую анизотропию имеет основной слой «легкая ось» или «легкая плоскость» (*рис. 2*).

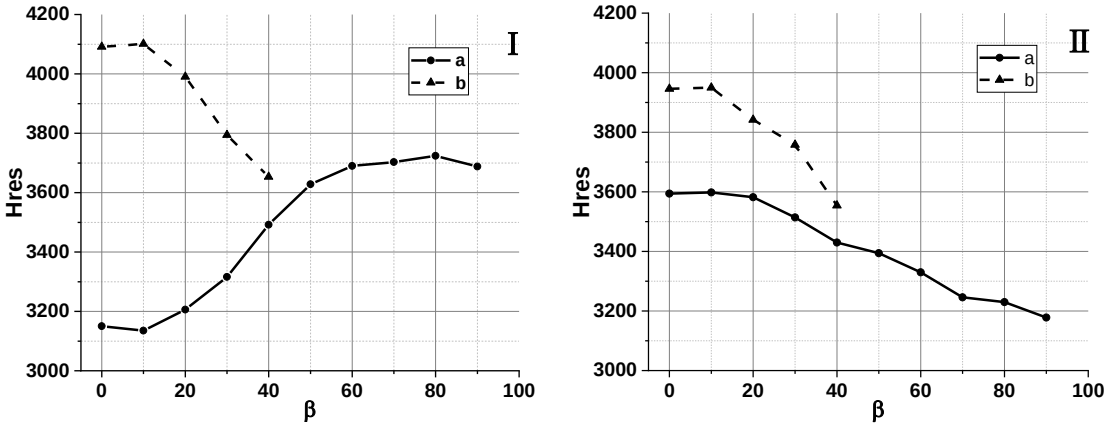



*рис.2. Ориентационные зависимости сигналов ФМР от основного (a) и переходного (b) слоёв в ЭПФГ; I – легкоосная пленка с легкоплоскостным подслоем, II – легкоплоскостная пленка с легкоплоскостным подслоем, β - угол между нормалью к пленке и направлением магнитного поля.*

Выводы:

В тонких пленках ферритов-гранатов, выращенных методом жидкофазной эпитаксии, в определённых случаях образуется переходной слой, способствующий когерентному срастанию двух кристаллических решеток. Переходной слой может быть идентифицирован методом ФМР и может обладать одинаковым или отличным от основного слоя типом магнитной кристаллографической анизотропии.

Исследование выполнено в рамках поддержанного федеральным государственным автономным образовательным учреждением высшего образования «Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского» гранта №ВГ11/2018».

Список публикаций:

*[1] Zvezdin A.K., Kotov V.A. Modern Magnetooptics and Magnetooptical Materials, 1997 – 404 c.*
*[2] Berzhansky V., Filippov D., Lugovskoy N., Physics procedia, 2016, 82C, 27-31 pp.*
*[3] Шаскольская, М. П. Кристаллография. – М.: Высшая школа, 1984 – 385 с.*
*[4] Случинская, И.А. Основы материаловедения и технологии полупроводников. – М.: Мир, 2002 – 372 с.*

# Мультиферроидные свойства кристалла $GdFe_3(BO_3)_4$, индуцированные высоким давлением

***Любутина Марианна Владимировна*[1]**

***Гаврилюк Александр Григорьевич*[1,2], *Андрюшин Н.Д.*[3,4], *Павловский М.С.*[3], *Зиненко Виктор Иванович*[3], *Огаркова Юлия Леонидовна*[1], *Любутин Игорь Савельевич*[1]**

[1]*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

[2]*Институт ядерной физики РАН*

[3]*Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН*

[4]*Сибирский Федеральный университет*

lyuanne@mail.ru

Редкоземельный ферроборат $GdFe_3(BO_3)_4$ имеет как *3d*, так и *4f* переходные элементы и является редким магнитным материалом, прозрачным в видимой части. В нормальных условиях кристалл $GdFe_3(BO3)_4$ имеет тригональную симметрию с пространственной группой *R*32. При воздействии высоких давлений в этом кристалле в области $P$ = 25 и 43 ГПа были обнаружены структурные и электронные фазовые переходы со резким уменьшением оптической щели и переходом диэлектрика в полупроводник. Таким образом, внешние воздействия приводят к новым эффектам, и может сильно влиять на свойства $GdFe_3(BO_3)_4$.

В настоящей работе при воздействии высоких давлений, создаваемых в камерах с алмазными наковальнями, изучены структурные и колебательные (фононные) свойства кристалла $GdFe_3(BO_3)_4$. Методом синхротронной мессбауэровской спектроскопии на ядрах Fe-57 (ядерное резонансное рассеяние вперед - NFS) и синхротронной рентгеновской дифракции исследован структурный фазовый переход в области давлений 23 ГПа. Методом рамановской спектроскопии изучено изменение фононных спектров кристалла при структурном переходе. Для анализа влияния гидростатического давления на фононный спектр кристалла $GdFe_3(BO_3)_4$ в фазе *R32*, были проведены расчеты динамики решетки при величинах приложенного давления от нормального до 30 ГПа. Расчет динамики решетки проводился с использованием вычисленных параметров решетки и координат атомов, соответствующих минимуму полной энергии. Параметры решетки и относительные координаты атомов, вычисленные в настоящей работе для фазы *R32*, хорошо согласуются с экспериментальными значениями.

Теоретический анализ рамановских спектров позволил установить, что при давлениях выше структурного перехода (около 23 ГПа) кристалл переходит в полярную фазу с пространственной группой *R3* и может обладать сегнетоэлектрическими свойствами (электрической поляризацией). При этом установлено хорошее согласие расчетных рамановских частот и экспериментальных данных при давлениях как в фазе низкого давления (*R32*), так и в фазе *R3* при давлениях выше структурного перехода.

Установлено, что при перестройке структуры с формированием *R3* фазы ион бора в позициях B(2) смещается вдоль оси Z и выходит из плоскости кислородного треугольника. Смещения ионов кислорода при перестройке структуры приводит к увеличению числа ближайших ионов в окружении бора и образуется бор-кислородный тетраэдр $BO_4$. При этом также значительно меняется ближайшее окружение иона гадолиния. Вместо шести ионов кислорода в *R32* фазе, в ближайшем окружении иона гадолиния в фазе *R3* появляется девять ионов кислорода. Это координация имеет сложную форму многогранника, нижнее основание которого представляет собой треугольник, а верхнее шестиугольник. Сам ион гадолиния смещается вдоль оси z в том же направлении, что и ион бора.

Учитывая магнитные свойства кристалла $GdFe_3(BO_3)_4$ при низких температурах следует рассматривать этот кристалл, как мультиферроик, индуцированный высоким давлением. Так как фаза *R3* является полярной, можно провести оценку электрической поляризации в этой фазе, приняв в качестве параэлектрической фазы фазу *R32*. Величина поляризации, вычисленная на основе смещения ионов и их зарядов, составила 290 мкл/см$^2$.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 17-02-00766 и № 18-02-00696), РНФ (проект № 16-12-10464), а также Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

# Структурное совершенство эпитаксиальных пленок

***Максимов Глеб Сергеевич***
***Наухацкий Игорь Анатольевич***
*Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт*
*Максимова Елена Михайловна, к.ф.-м.н.*
neondreamer00@gmail.com

Тонкие пленки и структуры на их основе обладают рядом физических и химических свойств, не встречающихся у объемных материалов, что делает их актуальными объектами экспериментального и теоретического исследования уже не одно десятилетие. Особое место в этих исследованиях занимают магнитные пленки в связи с возможностями их использования в устройствах твердотельной микро- и наноэлектроники.

Свойства пленок существенным образом определяются их микроструктурным строением, кристаллической структурой и кристаллографической ориентацией (текстурой), которые, в свою очередь, зависят от метода получения пленки, выбора технологических режимов напыления, материала подложки и состояния ее поверхности. По строению кристаллической структуры пленки можно разделить на 4 класса: аморфные, поликристаллические, текстурированные и эпитаксиальные пленки.

В представленной работе исследовались монокристаллические эпитаксиальные пленки со структурой феррит-гранатов, представляющие собой группу материалов, обладающих рядом уникальных свойств, интересных как для физических исследований, так и для технических приложений.

Основным источником дефектов, формирующихся в эпитаксиальных слоях в процессе выращивания кристаллических пленок, является различие в размерах кристаллической решетки сопрягающихся материалов пленки и подложки – $\Delta a = a_{film} - a_{substrate}$. Величина $\Delta a$ определяется методом рентгеноструктурного анализа по разности в положении дифракционных пиков (углов Брегга) от материалов пленки и подложки (*рис.1*).

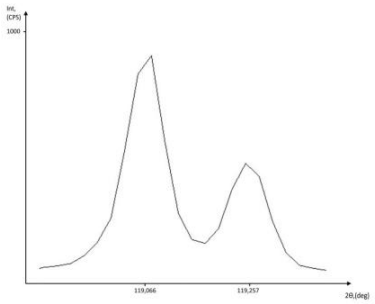



*рис. 1. Дифракционные пики (рефлекс (888)) от подложки (2θ=119,07°) и пленки (2θ=119,26°). Образец – пленка $(YBi)_3(FeAl)_5O_{12}$ с $\Delta a$=0,014.*

Рассогласование $\Delta a$ является основной структурной аттестационной характеристикой эпитаксиальных пленок. Однако, в ряде работ было отмечено, что при одинаковом химическом составе и равном значении величины рассогласования $\Delta a$ эпитаксиальные пленки проявляют разные физические свойства. В настоящей работе предлагается ввести дополнительную характеристику структурного совершенства пленки, а именно – величину областей когерентного рассеяния D:

$$D = \frac{K\lambda}{\beta cos\theta} \quad (1)$$

где $\lambda$ – длина волны рентгеновского излучения K – коэффициент ~1. $\beta$ – полуширина пика; $\theta$ – угол Брегга.

В результате было установлено, что параметры рассогласования, величины областей когерентного рассеяния и морфология поверхностей исследованных эпитаксиальных пленок коррелируют между собой.

Список публикаций:

*[1] Y.H. Kim, J.S. Kim, S.I. Kim, M.J. Levy Korean Phys. Soc., 43 (3), 400-405 (2003).*
*[2] A.N. Shaposhnikov, A.R. Prokopov, A.V. Karavainikov, V.N. Berzhansky, T.A. Mikhailova, V.A. Kotov, D.E. Balabanov, I.V. Sharay, O.Y. Salyuk, M. Vasiliev, V.O. Golub Materials Research Bulletin., 55., 19–25 (2014).*

# Синтез и исследование железофосфатов

***Милодан Ариолла Владимировна***

***Наухацкий Игорь Анатольевич***

*Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского, физико-технический институт*

*Сапига Алексей Владимирович, к.ф.-м.н.*

ariolla@mail.ru

Поиск новых оксидов на основе переходных металлов является одной из наиболее активных и интересных областей в физике твердого тела из-за открытия различных интересных свойств этих веществ и возможности их широкого использования в промышленности. Современное информационное общество трудно представить без портативных технических устройств, автономность работы которых обеспечивается относительно лёгкими и малогабаритными источниками электрической энергии, литий-ионными аккумуляторами. Они являются самыми энергоёмкими среди коммерчески реализованных перезаряжаемых электрохимических систем, что определило их повсеместное распространение. В настоящее время наиболее востребован железо фосфат лития (LiFePO4) используемый в современных литий-ионных аккумуляторах.

Обычно при получении железофосфатов широко используются следующие технологии: твердофазный, гидротермальный синтезы, спрей-пиролиз, золь-гель - метод, осаждение из газовой фазы, темплатные и микроэмульсионные технологии. Однако все эти технологии ориентированы на получение мелкодисперсных фракций конечного продукта, из которых впоследствии формируются пористые материалы для катодов литий-ионных аккумуляторов.

Основной целью данной работы было изучение возможности синтеза объемных кристаллов железофосфатов, которые можно было бы применить для исследования различными физическими методами. Предполагается, что использование кристаллов в отличие от порошков позволит лучше изучить тонкие механизмы молекулярной и ионной динамики в этих материалах, в том числе оптическими методами и методами ЯМР и ЭПР.

За основу были взяты результаты работ [1,2], в которых методом раствор-расплавной кристаллизации удалось получить объемные кристаллы $K_4Fe_4P_5O_{20}$ и работы [3] в которой выращивались кристаллы $Li_3Fe_2(PO_4)_3$. Структура $K_4Fe_4P_5O_{20}$ оказалось идентична структуре типичного волокнистого цеолита натролита. Поскольку этот минерал был ранее хорошо нами изучен, мы предприняли попытки синтезировать его изоструктурный аналог.

В качестве исходных материалов были взяты соединения $K_2CO_3$, $Fe_2O_3$ и $NH_4H_2PO_4$ . В качестве растворителя согласно предложению [1] использовался KF. Исходные вещества измельчались и просушивались в сушильном шкафу при 100$^o$C, затем смешивались в необходимой пропорции и помещались в керамические тигли с крышками. Тигли тщательно герметизировались с применением клея на основе цемента и жидкого стекла. После полного высыхания клея тигли помещались в электрическую печь шахтного типа и течении 10 часов нагревались до температуры 1050$^o$C. Затем выдерживались в течение 10 часов при этой температуре. После чего температура снижалась со скоростью 1$^o$/час. По достижении до 700$^o$C печь охлаждалась со скоростью 100$^o$/час до комнатной температуры.

В результате проведенных экспериментов были получены образцы, которые представляли собой спекшуюся твердую массу, в которой микроскопическими исследованиям было установлено наличие мелких кристаллических агрегатов игольчатой формы. Рентгеновский фазовый анализ подтвердил наличие фазы $K_4Fe_4P_5O_{20}$ в количестве до 32,1% в расплаве шихты. Исследования проводились для излучения $\lambda$ = 1.78897Å. Было установлено, что $K_4Fe_4P_5O_{20}$ синтезируется в тетрагональной симметрии $P\bar{4}21c$ с постоянными решетки a=9.74500Å, c=9.38000Å и Z=2.

Фазовый состав вещества был исследован методом рентгеновской порошковой дифракции (XRD), который был выполнен при комнатной температуре в диапазоне углов 2$\theta$ = 10°-100° с шириной щели, ограничивающей первичный пучок, равной 1мм, шагом сканирования 0,05$^o$ и фиксированным временем экспозиции 0,5с. Рентгенограмма полученного вещества показана на рисунке 1.

Также был выполнен полуколичественный анализ. Процентное содержание фаз в образце определено, исходя из известных корундовых чисел для каждой фазы, методом с использованием «корундового числа».

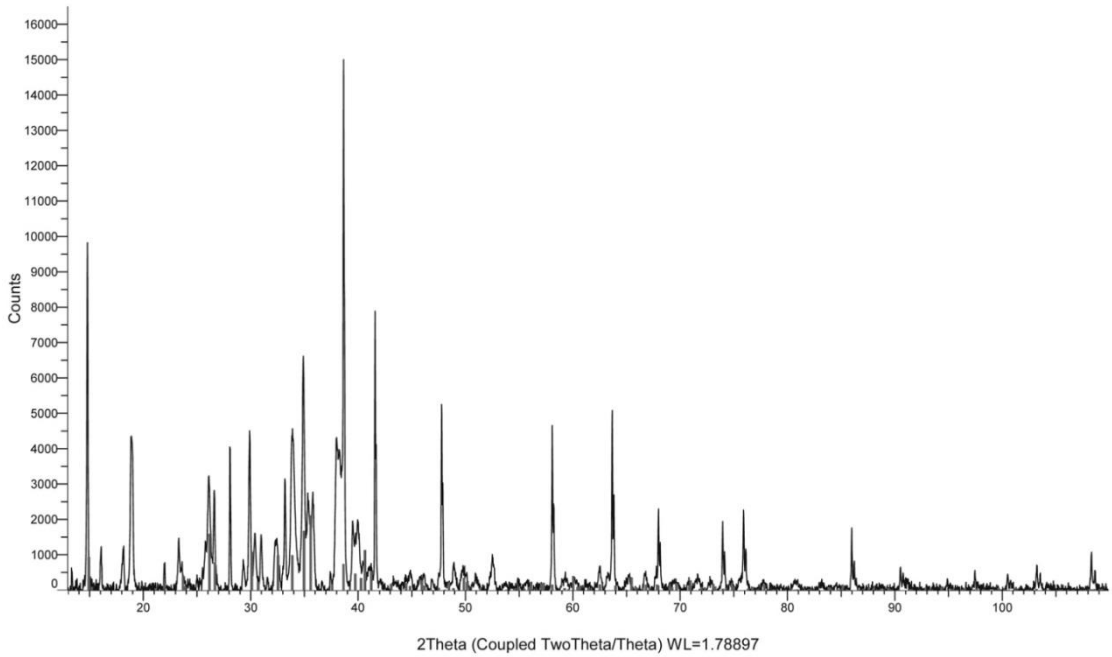



*рис 1: Рентгенограмма полученного вещества, чёрточками показаны рефлексы от $K_4Fe_4P_5O_{20}$.*

С целью поиска метода синтеза более крупных кристаллов основное внимание было уделено выбору режима охлаждения. Было предложено снижать температуру ступенчато на 50°C с выдержкой в течение трех часов. В результате были получены более крупные игольчатые агрегаты сросшихся кристаллов, размеры которых были толщиной порядка 0.1мм и достигали 1мм в длину.

В докладе обсуждают возможности синтеза крупных кристаллов $K_4Fe_4P_5O_{20}$ методом раствор-расплавного синтеза, в которых калий замещается на натрий, железо замещается на галлий.

Список публикаций:
*[1] Z. He, W. Zhang, W. Cheng, A. Okazawa and N. Kojima, // Inorganic Chemistry, 2012, 51, 7469.*
*[2] Z. He, W. Zhang, W. Cheng, A Okazawa and N. Kojima, // Dalton Trans., 2013, 42, 5860*
*[3] Z. He, W. Guo, W. Cheng, M. Itoh J. // Solid State Chemistry 215 (2014) 189–192*

## Исследование силы взаимодействия плоских проводников с током, помещенных в магнитную коллоидную наносистему

***Мкртчян Виктория Дмитриевна***
*Северо-Кавказский федеральный университет*
*Диканский Юрий Иванович, д.ф.-м.н.*
*vika_g96@mail.ru*

Исследование взаимодействия немагнитных тел в намагничивающейся жидкости во внешних силовых полях представляет собой актуальную научно-техническую задачу в связи с многочисленными техническими приложениями. Данной теме посвящено множество работ как теоретических, так и экспериментальных [1].

Однако на данный момент не имеется работ, в которых рассматривалось бы взаимодействие тел, помещенных в намагничивающуюся среду, когда по ним протекают электрические токи. Исключение составляет работа [2], в которой рассмотрено взаимодействие цилиндрических проводников с током в магнитной жидкости.

Вместе с тем, изучение эффектов, возникающих в системе проводников с током, помещенных в жидкую намагничивающуюся среду, позволило бы на более глубоком уровне описать магнитное взаимодействие, а также открыть возможности для создания высокоточного магнитометрического способа определения магнитной проницаемости жидких сред.

В настоящей работе предпринята попытка исследования особенностей взаимодействия двух тонких плоских проводников с током, помещенных в магнитную жидкость.

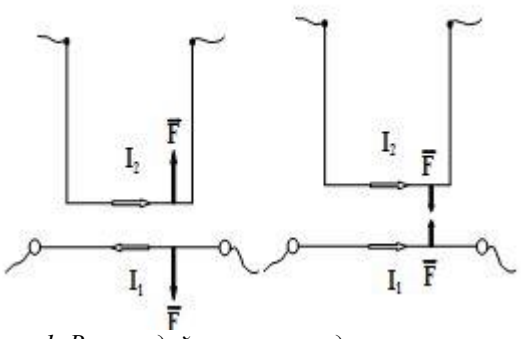



*рис. 1. Взаимодействие проводников с током в магнитной жидкости.*

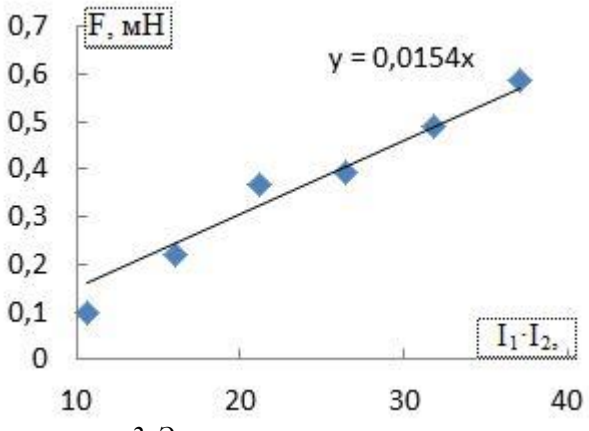



*рис. 2. Экспериментальная зависимость силы взаимодействия двух плоских проводников с током в магнитной жидкости от произведения силы токов в проводниках.*

Методика эксперимента состояла в следующем. В стеклянную прямоугольную ячейку высотой 14 *см*, в центре которой горизонтально располагалась плоская текстолитовая пластинка (толщина 2 *мм*, ширина $h = 5$ *мм*, длина $l_1 = 12\,см$) с медным покрытием помещалась прямоугольная проволочная рамка, горизонтальная часть которой представляла собой такую же пластинку, как в ячейке, но длиной $l_2 = 10\,см$, и располагалась параллельно проводнику в ячейке (*рис. 1*). Рамка подвешивалась к электронным весам. Расстояние между центрами проводников составляло $y = 2$ *мм*. Ячейка целиком заполнялась магнитной коллоидной наносистемой, представляющей собой коллоидный раствор магнетита (средний размер частиц 10 *нм*) в керосине с олеиновой кислотой в качестве стабилизатора. Плотность магнитной жидкости равнялась 1460 кг/м$^3$.

По проводникам пропускались постоянные токи, направленные как параллельно друг другу, так и антипараллельно. Сила тока измерялась с помощью амперметров, включенных в цепь с соответствующим проводником. Ток в нижнем проводнике оставался неизменным, его величина составляла 5,3 А. Величина тока в верхнем проводнике (рамке) последовательно изменялась от 1 до 7 А с шагом 1 А. При каждом значении тока в рамке фиксировались показания весов.

Было обнаружено, что в обоих случаях – как однонаправленных, так и разнонаправленных токов – сила взаимодействия между проводниками приводила к изменению положения горизонтальной части рамки в вертикальной плоскости, что в свою очередь влекло за собой изменение показания весов. В случае однонаправленных токов эти изменения были положительными – проводники притягивались, в случае разнонаправленных токов изменения были отрицательными – проводники отталкивались. Было установлено, что в пределах погрешностей измерений, величина силы взаимодействия не зависит от ориентации токов.

По итогам проведенных экспериментов была получена зависимость силы взаимодействия двух плоских проводников с током в магнитной жидкости от произведения силы токов в проводниках (*рис. 2*). Погрешность измерений лежит в пределах размеров экспериментальных точек на графике.

Для определения магнитной проницаемости магнитной жидкости была предпринята попытка измерения сил взаимодействия плоских проводников в воздухе. Однако чувствительность измерительной системы (электронных весов) не позволила измерить столь малые значения. В связи с этим, зависимость силы взаимодействия от произведения сил токов в проводниках, когда проводники расположены в воздухе, была получена путем расчета по формуле:

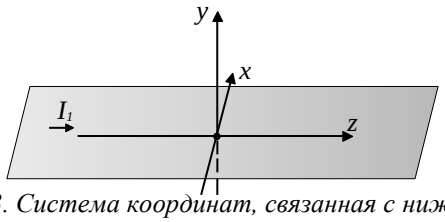



*рис. 3. Система координат, связанная с нижним проводником.*

$$F = F_y = \int_{-\frac{l_2}{2}}^{\frac{l_2}{2}} \int_{-h}^{h} \frac{I_2 \cdot B_x(x,z)}{2 \cdot h} \cdot dx \cdot dz \text{, т.к. } F_x = 0. \qquad (1)$$

где $I_2$ – сила тока в рамке, $B_x(x,z)$ – индукция магнитного поля нижнего проводника в месте нахождения верхнего (горизонтальной части рамки) в соответствии с выбранной системой координат (*рис. 3*).

В работе [2], было показано, что магнитная проницаемость использовавшейся в опытах магнитной жидкости, определенная по закону Ампера (как отношение коэффициента угла наклона графика зависимости силы от произведения сил токов в магнитной жидкости к аналогичному коэффициенту для случая взаимодействия в воздухе), имеет большее значение, чем полученное с помощью вибрационного магнитометра, в связи с чем был сделан вывод о наличии дополнительного механизма взаимодействия, заключающегося в возникновении расклинивающего давления в жидкости за счет ее перетекания в области с большими значениями поля.

В случае плоских проводников оказалось, что значения магнитной проницаемости магнитной жидкости, определенные по закону Ампера и с помощью вибрационного магнитометра не отличаются.

Список публикаций:

*[1] Розенцвейг Р.Е. Феррогидродинамика. М.: Мир. 1989.*

*[2] Мкртчян Л. С., Федина О.В., Груненко В.Д. // Физико-химические и прикладные проблемы магнитных дисперсных наносистем: сборник научных трудов VI Всероссийской научной конференции: Изд-во ФГАОУ ВО СКФУ. 2017. С. 63-69.*

## Магниторезонансные исследования тонкой эпитаксиальной пленки $FeBO_3$

***Могиленец Юлия Александровна*[1]**

***Селезнева Кира Андреевна*[1], *Ягупов Сергей Владимирович*[1], *Стругацкий Марк Борисович*[1],**

***Дровосеков Алексей Борисович*[2], *Крейнес Наталия Михайловна*[2], *Клява Янис*[3]**

[1]*Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт*

[2] *Институт физических проблем имени П.Л. Капицы РАН*

[3] *LOMA, UMR 5798 Université de Bordeaux-CNRS, Talence, France*

*Селезнева К.А., к.ф.-м.н.; Стругацкий М.Б., д.ф.-м.н.*

mogilenecya@cfuv.ru

Борат железа обладает уникальным сочетанием магнитных и оптических свойств, поэтому он представляет большой интерес для практических применений в современных высокотехнологичных отраслях науки и техники. С точки зрения магнитной структуры $FeBO_3$ является двухподрешеточным антиферромагнетиком со слабым ферромагнетизмом [1]. Особый интерес для практических применений представляет поверхностный магнетизм на небазисных гранях монокристаллов бората железа [2, 3]. Для более подробного изучения механизма формирования этого явления, может служить тонкая эпитаксиальная пленка $FeBO_3$ на диамагнитной подложке $GaBO_3$ [4]. Разработанная нами методика позволяет получать пленки хорошего качества, пригодные для магнито-оптических, магнито-акустических и резонансных исследований.

Цель данной работы − определить методом антиферромагнитного резонанса (АФМР) магнитные характеристики для тонкой эпитаксиальной пленки бората железа: поле Дзялошинского-Мории, $H_D$ и величину изотропной энергетической щели, $H_\Delta^2$.

Магниторезонансные исследования проводились в интервале частот 15,1-35,7 ГГц при температурах 77-300 К, в магнитном поле $H$ до 10 кЭ. Получены экспериментальные частотно-полевые зависимости для пленки бората железа при различных температурах (см. рис. 1).

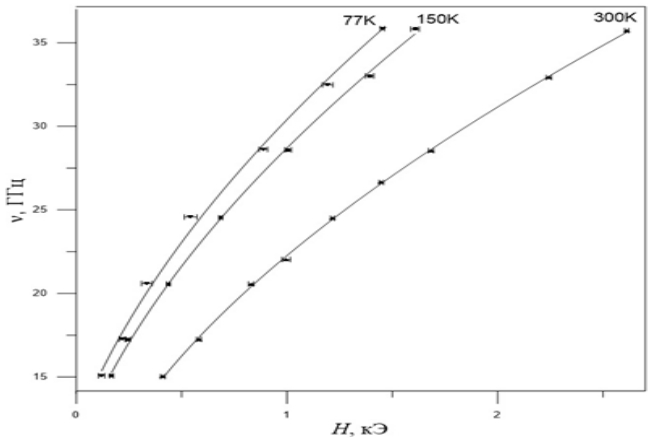



*рис.1. Частотно-полевые зависимости для пленки $FeBO_3$ при различных температурах (точки — экспериментальные данные, линии - аппроксимация).*

В случае, когда внешнее магнитное поле приложено в базисной плоскости образца, низкочастотная ветвь АФМР описывается следующим выражением [5]:

$$\nu = \gamma[H(H + H_D) + H_\Delta^2]^{1/2}, \quad (1)$$

где γ — гиромагнитное отношение, ν — частота приложенного микроволнового поля. С помощью этого выражения получены значения $H_D$ и $H_\Delta^2$ для пленки $FeBO_3$, результаты приведены в таблице:

| | | | |
|---|---|---|---|
| $T$, K | 77 | 150 | 300 |
| $H_D$, кЭ | 98,7±2,8 | 89,4±1,2 | 57,6±0,4 |
| $H_\Delta^2$ , кЭ$^2$ | 18,2±1,6 | 14,7±0,8 | 4,6±0,5 |

Сравнение результатов для пленки бората железа с имеющимися в литературе [5] данными для монокристаллов бората железа показывает, что поле Дзялошинского-Мории для них практически не отличается. В то же время, изотропная энергетическая щель в первом случае значительно больше, что объясняется микроскопическими механическими напряжениями, возникающими в результате несовпадения структурных параметров пленки и подложки [4].

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-3200210 «мол_а»).

Список публикаций:

*[1] Diehl R., Jantz W., Nolang B.I. and Wettling W. // Current Topics in Materials Science ed. E Kaldis 1984. vol.11, p.241.*
*[2] Zubov V.E., Krinchik G.S., Seleznyov V.N. and Strugatsky M.B. // J.Magn.Magn.Mater. 1990. 86, pp.105-114.*
*[3] Maksimova E.M., Nauhatsky I.A., Strugatsky M.B. and Zubov V.E. // J.Magn.Magn.Mater. 2010. 322, pp.477-480.*
*[4] Yagupov S., Strugatsky M., Seleznyova K., Mogilenec Yu., Milyukova E., Maksimova E., Nauhatsky I., Drovosekov A., Kreines N., Kliava J. // J.Magn.Magn.Mater. 2015. 417, pp.338-343.*
*[5] Velikov L.V., Prokhorov A.S., Rudashevskii E.G., Seleznev V.N. // Sov. Phys. JETP 1974. 39, p.909.*

## Разработка температурной приставки для рентгеноструктурного исследования веществ при отрицательных температурах

***Наухацкий Игорь Анатольевич***
***Максимова Елена Михайловна***
*Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского*
*Максимова Елена Михайловна, к.ф.-м.н.*
*nauhatsky@cfuv.ru*

Современные производители температурных приставок к рентгеновским дифрактометрам, особенно для исследований при низких температурах, предлагают весьма дорогостоящие варианты, часто не отвечающие геометрии размещения этих приставок в имеющейся технике. Целью данной работы являлась разработка и сбор температурного модуля для рентгеновских дифрактометров общего назначения, имеющего низкую себестоимость.

В отличие от серийных производителей, в приставках которых для охлаждения образца используется непрерывный поток жидкого азота или газового гелия, в данной работе для получения отрицательных температур предлагается использовать термоэлектрические преобразователи – элементы Пельтье. В конструкции модуля элементы располагаются друг на друге по типу пирамиды. В основании находится четыре элемента Пельтье, на которых расположен каскад. Охлаждение горячей стороны элементов Пельтье производится посредством потока воды через радиаторы жидкостного типа.

Мониторинг температур производится при помощи термопар К-типа. Данная термопара изготовляется на основе сочетания металлов: хромель, алюмель. Сочетание этих металлов позволяет производить замеры температур в диапазоне от – 270 до 1372 градусов по Цельсию. Контакт первой термопары происходит непосредственно около исследуемого образца. Вторая термопара расположена между четырьмя элементами Пельтье, вблизи горячей стороны каскада, и отслеживает промежуточную температуру между элементами. Третья термопара используется в случае с замкнутой системой водяного охлаждения и помещается в резервуар с водой. Для преобразования значений, полученных с термопар, используется преобразователи сигнала термопары в цифровой сигнал - MAX31855 и MAX6675. Для мониторинга и управления конструкцией используется контроллер Atmega2560 на базе модуля Arduino. В схеме управления питанием конструкции используются стабилизатор напряжения, цифро-аналоговый преобразователь «AD557», операционный усилитель «CA3140» и составные транзисторы.

На плате управления расположены контакты подключения контроллера, питания схемы и контакты для второго составного транзистора, а также два ЦАП и пять ОУ. Контроллер управления подключен к двум цифро-аналоговым преобразователям. К первому преобразователю подключен операционный усилитель, который обеспечивает усиление сигнала в два раза и передает сигнал на первый составной транзистор, который, соответственно, управляет вторым составным транзистором, который, в свою очередь, управляет питанием каскада элементов Пельтье. Ко второму преобразователю подключено параллельно четыре операционных усилителя, которые управляют своими составными транзисторами и обеспечивают питанием четыре элемента Пельтье.

Конструкция, в которой располагаются элементы Пельтье и радиаторы, состоит из трех частей: центрального блока, изоляционного купола и задней крышки радиаторов. Центральный блок располагает в себе все элементы Пельтье. Между элементами и корпусом находится термоизоляционный материал. Все соединения между контактными поверхностями обработаны термопастой для получения лучшего контакта и хорошего теплообмена. Сзади расположена крышка радиаторов в которой расположены четыре радиатора жидкостного типа, также крышка фиксирует все внутренние элементы. Спереди расположен изоляционный купол, во внутренней стороне которого расположена емкость для поглощающего влагу материала. Данное конструкционное решение создано для того, чтобы при отрицательных температурах на исследуемом образце не образовывалось обледенение.

В куполе присутствует щель, через которую проходят рентгеновские лучи. Щель герметично закрывается тонкой пленкой. В качестве материала для изготовления корпуса был использован пластик марки ABS, так как он выдерживает температуры до – 50 градусов по Цельсию в динамическом режиме работы, а в стационарном режиме еще более низкие температуры.

Предложенный в работе температурный модуль может быть использован для целой серии отечественных дифрактометров марки ДРОН: от ДРОН-2 до ДРОН-6.

## ТермоЭДС в биологических жидкостях

***Оборотова Любовь Александровна***
*Елецкий государственный университет имени И. А. Бунина*
*Кузнецов Денис Владимирович к.ф.-м.н.*
olubov97@yandex.ru

В работах [1, 2] экспериментально и теоретически описаны термоэлектрические эффекты, возникающие в растворах электролитов. В работе [3] описаны эксперименты, в которых термоэлектрические эффекты наблюдались в жидких заряженных коллоидных системах, а также показано, что термоЭДС таких систем значительно превосходит по величине термоЭДС, наблюдающуюся в истинных растворах.

В природе очень широко распространены дисперсные системы, у которых одно вещество равномерно распределено в виде частичек в другом, растворителе, в частности, в биологических жидкостях живых организмов. Кровь представляет собой полидисперсную систему — суспензию эритроцитов в плазме, белки образуют коллоидный раствор, органические вещества и соли представляют собой истинный раствор [4].

Около 90% в составе плазмы крови занимает вода, а остальные ее составляющие – сухие вещества: белки, углеводы, жиры, витамины, гормоны, глюкоза и минеральные соли. Порядка 8% состава плазмы, приходится на белки. Белки плазмы крови можно разделить на три группы: альбумины, глобулины и фибриоген. Самой распространенной группой являются альбумины.

В качестве предмета исследования были выбраны:

1. Истинный раствор – раствор Рингера. Он является аналогом по химическому составу плазмы крови без белков и форменных элементов. Химический состав раствора Рингера (на 1 л воды) содержит: натрия хлорид – 8,6 г, калия хлорид – 0,3 г, кальция хлорида гексагидрат – 0,25 г;
2. Коллоидный раствор – раствор альбумина. Альбумины – мелкодисперсные белки, с большой молекулярной массой, что позволяет рассматривать их как коллоидные частицы.

Для измерения термоЭДС была изготовлена экспериментальная установка [1-3], основной частью которой являлась U-образная трубка из химического стекла сечением около 1 $см^2$ и длиной около 20 см. В открытые концы колен трубки в раствор опускались хлорсеребряные электроды и датчики, регистрирующие температуру. Для создания градиента температуры в верхней части правого колена на трубке располагался нагреватель в виде обмотки из нихромовой проволоки. Напряжение, подаваемое на нагреватель, формировало

разность температур, возникающая термоэлектрическая разность потенциалов фиксировалась иономером ИПЛ – 113 и вместе с показаниями с термодатчика 4 подается на ПК.

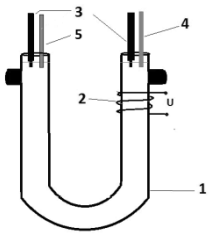
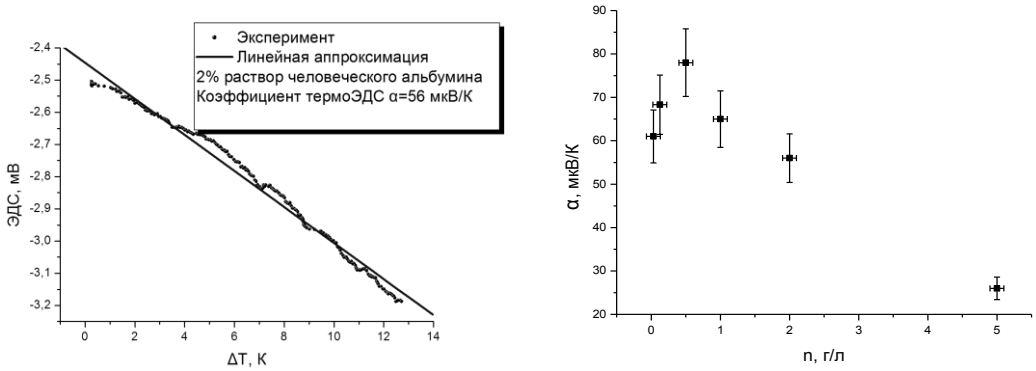



*рис.1. Экспериментальная установка:*
*1- U-образная стеклянная трубка; 2- нагреватель; 3- хлорсеребряные электроды; 4-термодатчик, 5-термометр*

Экспериментальные исследования термоэлектрического эффекта в растворе Рингера показали, что величина коэффициента термоЭДС очень мала, опыт имеет низкую повторяемость, что обусловлено малостью величины и сравнимостью ее с погрешностью измерений.

Раствор нагревался от комнатной температуры до температуры не выше 40 °С. На (рис. 2а) представлена зависимость термоЭДС от разности температур между коленами U- образной трубки. Линейная аппроксимация данной зависимости позволяет определить коэффициент термоЭДС. Была проведена серия измерений термоЭДС от концентрации альбумина в водном растворе.




*а)* *б)*

*рис.2. ТермоЭДС в водном растворе альбумина*

Коэффициент термоэлектрической ЭДС существенно зависит от концентрации (рис.2б) и имеет ярко выраженный максимум. Это, по-видимому, обусловлено изменением структурного окружения коллоидной частицы при разбавлении.

По результатам экспериментального исследования термоэлектрического эффекта в растворе Рингера и растворе альбумина можно сделать вывод, что основной вклад в формирование термоЭДС в плазме крови вносит коллоидная составляющая. Влияние вклада форменных элементов (клеток крови) на величину коэффициента термоЭДС является задачей будущих исследований.

Список публикаций:

*[1] Грабов В.М., Зайцев А.А., Кузнецов Д.В., Сидоров А.В. Термоэлектрокинетические явления, эксперимент и теоретическое описание. // Термоэлектрики и их применения: Доклады*
*Межгосударственной конференции, Санкт-Петербург, ФБГУН ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН - 2015.- С.173-178.*
*[2] Грабов В.М., Сидоров А.В., Зайцев А.А., Кузнецов Д.В. // Моделирование процессов нестационарного тепломассопереноса в водных растворах сильных электролитов. Труды девятой всероссийской конференции "Необратимые процессы в природе и технике" 25-27 января 2017 года Москва ч.1 МГТУ им. Н.Э. Баумана с. 251-257.*
*[3] Грабов В.М., Зайцев А.А., Кузнецов Д.В., Сидоров А.В. // Термоэлектрокинетические и термоэлектрические явления в живых организмах. Тезисы докладов Второй российской конференции с международным участием Физика- наукам о жизни 18-22 сент. ФТИ им. А.Ф. Иоффе Санкт-Петербург 2017 г.*
*[4] Под ред. А.Д. Ноздрачева // Начала физиологии. Учебник для вузов. СПб.: Лань.2001.*

## Фазовые переходы в дираковском 3D полуметалле $Cd_3As_2$ с содержанием наногранул MnAs при высоких давлениях

***Отаев Амирджон Ахмаджонович***

***Мельникова Нина Владимировна, Тебеньков Александр Владимирович, Суханова Галина Витальевна, Сайпулаева Луиза Абдурахмановна***

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

*Мельникова Нина Владимировна, к.ф.-м.н.*

Otaev-95@mail.ru

Одной из основных задач современной физики твердого тела является поиск, синтез и исследование структуры и свойств новых материалов при различных внешних воздействиях для перспективного направления твердотельной электроники – спинтроники. Приборы на основе этих материалов должны обладать высоким быстродействием, малым тепловыделением, технологичностью в изготовлении, устойчиво работать в широком диапазоне давлений, температур и ионизирующего излучения [1]. Одним из наиболее многообещающих материалов в этой сфере является композит на основе дираковского полуметалла $Cd_3As_2$ с содержанием наногранул MnAs [2].

С целью установления наличия барических фазовых переходов в композитах $Cd_3As_2$+n мас.%MnAs (n = 10, 20, 30, 44.7) в настоящей работе исследовали поведение электросопротивления и термоэдс (как наиболее чувствительных к фазовым переходам параметров) и процессы их релаксации при давлениях до 50 ГПа.

Первый фазовый переход при высоких давлениях в окрестности 4,4 ГПа был обнаружен ранее при изучении барических зависимостей удельного электросопротивления и магнитосопротивления в композите $Cd_3As_2$ + n мас.% MnAs (где n = 30 и 44,7) [3, 4].

Исследования транспортных свойств композитов при давлениях (P) до 50 ГПа показали, что все материалы проявляют особенности в поведении электросопротивления (R) (резкое его уменьшение на порядок при росте давления) и термоэдс (S) (экстремумы, точки перегиба на кривых S(P) или гистерезис по давлению) в интервалах: 25-30 ГПа в случае n=10 и n=20; 30-35 ГПа для n=30; 20-25 ГПа и 35-40 ГПа по данным поведения R(P) и 30-33 ГПа из зависимостей S(P) для n=44.7. Возможные причины такого поведения электрических характеристик для материала с n=44.7 приведены в работах [5, 6] и связаны с особенностями электронной подсистемы матрицы композита $Cd_3As_2$. В этих же указанных областях давлений наблюдается увеличение времен релаксации термоэдс.

Таким образом, в области давлений 30-35 ГПа в композитах $Cd_3As_2$+ MnAs существует второй фазовый переход, предположительно связанный с изменением в электронной подсистеме.

Список публикаций:

*[1] Crassee I., Sankar R., Lee L. et al // Phys. Rev. Materials. 2018. V. 2. P. 92-105.*

*[2] Риль А.И., Кочура А.В., Маренкин С.Ф. // Известия Юго-Западного государственного университета. 2017. Т. 7, №2(23). С. 120-134.*

*[3] Алибеков А. Г., Моллаев А. Ю., Сайпуллаева Л. А. и др // НЕОРГАНИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ. 2016. Т. 52, № 4. С.402-405.*

*[4] Алибеков А.Г., Моллаев А. Ю., Сайпуллаева Л. А. и др. // ЖУРНАЛ НЕОРГ-ОЙ ХИМИИ. 2017. Т. 62, № 1. С. 87–91.*

*[5] Мельникова Н.В., Тебеньков А.В., Суханова Г.В. и др. // ФТТ. 2018. Т. 60, №3. С. 490-494.*

*[6] Мельникова Н.В., Маренкин С.Ф. и др. // Физ. и техн. высоких давлений. 2018. Т. 28, №2. С. 5-12.*

## Особенности трансформации поляритонного спектра, вызванные упругой деформацией и дефектами структуры в цепочке микропор

***Паладян Юлия Александровна***

*Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина*

*Румянцев Владимир Васильевич, д.ф.-м.н.*

paladyan0108@yandex.ru

Важным свойством фотонных структур с запрещенной зоной является возможность получения так называемого «медленного» света, имеющего большие перспективы применения в разработке устройств квантовой обработки оптической информации. В частности, эффективное уменьшение групповой скорости продемонстрировано в связанных волноводных оптических резонаторах, различных типах твердотельных многослойных полупроводниковых структурах. В связи с созданием оптоэлектронных устройств возрос интерес к изучению оптических мод в системе микрорезонаторов. При этом приходится решать ряд проблем, связанных с формированием поляритонных структур – особого класса фотонных кристаллов, в которых реализуется сильная связь квантовых возмущений (экситонов) среды и оптического поля. Поляритонной

структурой, в частности, может быть пространственно периодическая атомарная система, образованная слабо взаимодействующими ансамблями двухуровневых атомов и оптического поля в туннельно связанном массиве микропор (резонаторов). В настоящее время интенсивно развивается фотоника несовершенных структур. Проведенные в рамках неидеальной фотоники исследования показали, что введением в исследуемую систему определенных структурных дефектов или в результате управляемого внешнего воздействия (например, упругой деформации) можно добиться необходимого изменения энергетического спектра элементарных электромагнитных возбуждений и соответствующих оптических свойств композитного материала.

В данной работе рассмотрены особенности дисперсии электромагнитных возбуждений в 1D решетке микропор в однородной и изотропной среде, находящейся в условиях одноосных напряжений (сжатие или растяжение), направленных вдоль оси цепочки. Предполагается, что в такой цепочке одинаковые микропоры-резонаторы содержат также случайным образом квантовые точки двух типов с концентрациями $C_C^{(1)}$ и $C_C^{(2)}$. Причем эти микропоры-резонаторы случайным образом удалены на расстояниях между ближайшими соседями либо $a_1(\varepsilon)$ с концентрацией $C_T^{(1)}$, либо $a_2(\varepsilon)$ с концентрацией $C_T^{(2)}$ (причем $C_C^{(1)} + C_C^{(2)} = 1$, следовательно $C_C^{(1)} = 1 - C_C^{(2)} \equiv C_C$ и $C_T^{(1)} + C_T^{(2)} = 1$, $C_T^{(1)} = 1 - C_T^{(2)} \equiv C_T$ ).

Выполнено численное моделирование спектра электромагнитных возбуждений в неидеальной 1D решетке связанных микрорезонаторов, как содержащих квантовые точки, так и без них. В рамках приближения виртуального кристалла [1] исследованы особенности дисперсии электромагнитных возбуждений такой системы, вызванные как вариацией расстояний между резонаторами, так и вариацией квантовых точек по составу, изучено влияние однородной упругой деформации на изменение спектра поляритонных возбуждений в исследуемой цепочке микропор.

Расчет поляритонного спектра $\Omega_{\pm}(k,\varepsilon)$ системы микропор (в зависимости от параметра деформации $\varepsilon$) проведем, следуя методике [2,3], путем диагонализации усредненного (процедура усреднения обозначена угловыми скобками) гамильтониана $\hat{H}(\hat{\varepsilon})$ в предположении, что плотность возбужденных состояний элементов в резонаторной и атомарной подсистемах мала, в одноуровневой модели в приближении Гайтлера-Лондона. В результате применения вышеуказанной методики получаем систему линейных однородных уравнений, условием разрешимости которой является равенство нулю детерминанта:

$$\begin{Vmatrix} \hbar\left\langle \omega_n^{at}(\varepsilon)\right\rangle_C + \left\langle V(k,\varepsilon)\right\rangle_{C,T} - \hbar\Omega(k,\varepsilon) & \left\langle g_n(\varepsilon)\right\rangle_C \\ \left\langle g_n(\varepsilon)\right\rangle_C & \hbar\omega^{ph}(\varepsilon) - \left\langle A(k,\varepsilon)\right\rangle_T - \hbar\Omega(k,\varepsilon) \end{Vmatrix} = 0 \qquad (1)$$

Численный расчет соответствующих величин выполнен для конкретных модельных значений частот резонансных фотонных мод, локализованных в резонаторах с собственной частотой $\omega^{ph} = 2\pi \times 387{,}5 ТГц \approx 2434 \cdot 10^{12}\ Гц$, квантовых точек с частотами возбуждения $\omega^{at} = 2\pi \times 191 ТГц \approx 1200 \cdot 10^{12}\ Гц$. Величины $\left\langle A(k,\varepsilon)\right\rangle_T$, $\left\langle V(k,\varepsilon)\right\rangle_{C,T}$ и $\left\langle g_n(\varepsilon)\right\rangle_C$ характеризуют соответственно перекрытие оптических полей резонаторов в соседних узлах, резонансное взаимодействия квантовых точек в этих узлах, резонансное взаимодействие квантовой точки в узле с локализованным в этом узле электромагнитным полем [3]. Поверхности, описывающие дисперсионную зависимость частот $\Omega_{\pm}(k,\varepsilon,C_C,C_T)$ исследуемых коллективных возбуждений в неидеальной решетке микрорезонаторов, представлены на *(рис.1)*.

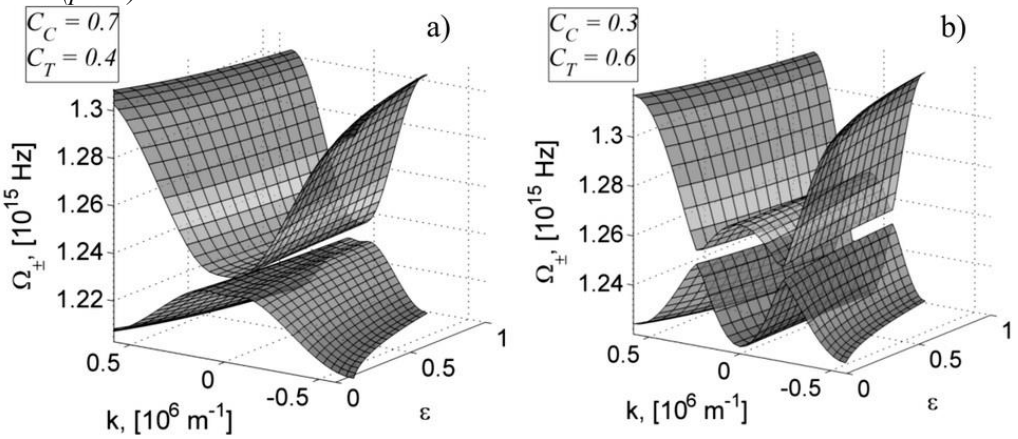



*рис.1. Дисперсионная зависимость частот $\Omega_{\pm}(k,\varepsilon,C_C,C_T)$ исследуемых коллективных возбуждений в неидеальной решетке 1D микрорезонаторов*

Выполненное в работе изучение зависимости параметров спектра элементарных возбуждений бинарной 1D решетки связанных микрорезонаторов, показывает, что в результате наличия структурных дефектов и упругих деформаций можно добиться необходимого изменения энергетической структуры электромагнитных возбуждений исследуемой системы микропор и, следовательно, оптических ее свойств, обусловленных перестройкой электромагнитного спектра. Представленные результаты численного моделирования позволяют расширить возможности создания нового класса функциональных материалов – поляритонных кристаллических систем (цепочек микропор, содержащих квантовые точки), позволяющих контролировать распространение электромагнитных возбуждений в таких композитных структурах, находящихся под внешним воздействием.

Список публикаций:

*[1] Займан Дж. Модели беспорядка. М.: Мир. 1982. 592с.*
*[2] Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Gumennyk K.V., Sychanova M.V., Kavokin A.V.// Nature. Scientific Reports. 2014. № 4. P. 6945.*
*[3] Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Gumennyk K.V., Gurov D.A., Kavokin A.V. // Superlattices and Microstructures. 2018. № 120. P. 642.*

## Вихревые решетки поверхностных плазмон-поляритонов на границе раздела металл-диэлектрик

***Перескоков Владислав Сергеевич***
*Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт*
*Дзедолик И. В., д.ф.-м.н.*
pereskokow@gmail.com

Генерация и управление плазмон-поляритонными волнами привлекают все большее внимание исследователей по всему миру в связи с перспективой создания устройств плазмонной нано-оптики [1-3]. Линейные и нелинейные плазмон-поляритонные волны распространяются по границе раздела диэлектрика и металла в виде поверхностных плазмон-поляритонов (ППП) [1]. В результате относительно большой величины эффективного показателя преломления на границе раздела диэлектрика и металла происходит уменьшение длины волны ППП по сравнению с длиной оптической волны той же частоты в свободном пространстве. При этом возбужденные ППП локализуются вблизи границы раздела сред и распространяются по поверхности на расстояния порядка сотен длин волн.

Цель работы – исследовать процесс формирования мод ППП на поверхности металлического слоя, последующего отражения ППП от границы неоднородности в металлическом слое и возникновения плазмонных вихрей при интерференции ППП. Исследовать влияние формы границы неоднородности на распределение вихрей в интерференционном поле поверхностных плазмон-поляритонов.

Нормальная к границе раздела сред компонента электрического поля ППП в точке *(x, y)* при интерференции падающих и отраженных ППП на поверхности металла имеет вид

$$E_{zM} = A_z\left[exp\left(i\phi_{TM}\right)+exp\left(i\phi_E^-\right)+exp\left(i\phi_E^+\right)\right] \qquad (1)$$

где $A_z = Ae^{-\alpha_0 z}\varepsilon_0^{-1}\left[\varepsilon_0\varepsilon_M/\left(\varepsilon_0+\varepsilon_M\right)\right]^{1/2}$, $A=const$, $\alpha_0=\left(\beta_M^2-\omega^2\varepsilon_0/c^2\right)^{1/2}$ - поперечный декремент моды в диэлектрической среде с $\varepsilon_0$, $\beta_M=\frac{\omega}{c}\left(\varepsilon_M\varepsilon_0\right)^{1/2}\left(\varepsilon_M+\varepsilon_0\right)^{-1/2}$ - постоянная распространения, $\phi_{TM}=\beta_M Y-\omega t$, $\phi_E^{\pm}=\beta_M\left[x\sin\left(\pm\theta\right)-Y\cos\theta\right]-\omega t$, $Y=y+y_m$. Распределение нормальной компоненты электрического поля $E_{zM}=\left[\mathrm{Re}\left(E_{zM}\right)^2+\mathrm{Im}\left(E_{zM}\right)^2\right]^{1/2}$ при интерференции ППП в рассматриваемом случае в фиксированный момент времени $t$ представлено на рис. 1.

Распространяющиеся по поверхности металла ППП, и рассеянные на границе неоднородности в металлическом слое ППП, интерферируют. При интерференции падающих и рассеянных ППП возникают точки сингулярности, в которых образуются вихри с винтовой дислокацией фазы.

Неоднородность в металлическом слое можно создать с помощью внешнего электрического поля, варьируя потенциал металлических зондов, расположенных над поверхностью металла [4]. Изменяя радиус кривизны границы неоднородности диэлектрической проницаемости поверхности металла с помощью внешнего электростатического поля можно управлять топологией интерференционного поля ППП.

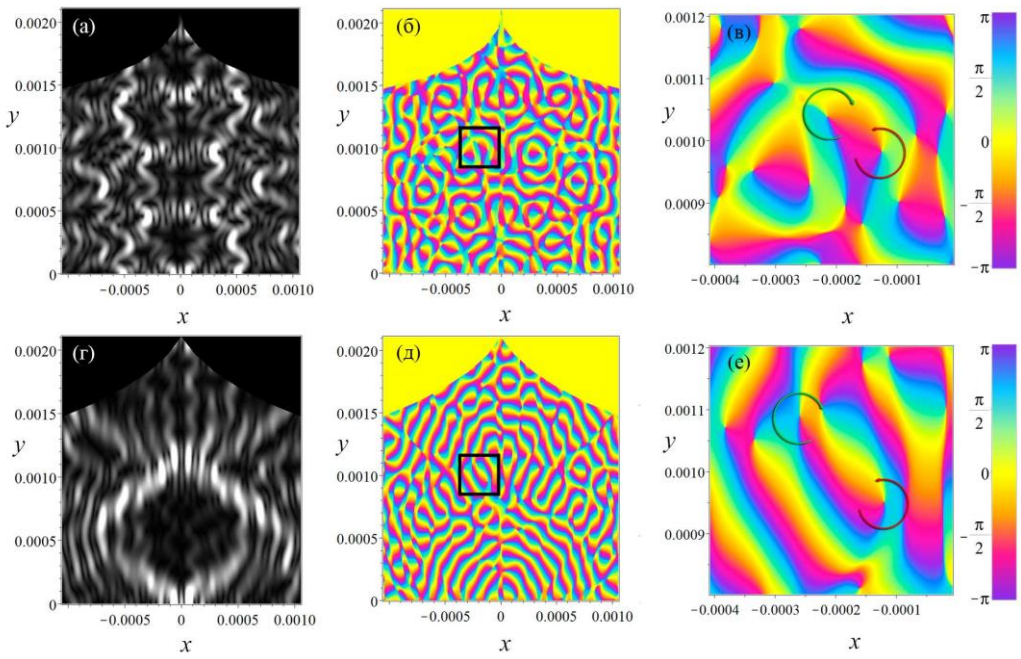



*рис.1. Распределение компоненты электрического вектора $E_z$ на поверхности металла при интерференции ППП, падающих на неоднородность и отраженных от границы неоднородности в металлическом слое в форме ласточкиного хвоста: (а) интерференционные полосы амплитуды, (б) распределение фазы при радиусе кривизны границы $r_0 = 5\,\mu m$, (в) вихри ППП с топологическим зарядом $\ell_M = +1$ (красная стрелка, против часовой) и $\ell_M = -1$ (зеленая стрелка, по часовой) в выделенной области, $r_0 = 5\,\mu m$, (г) интерференционные полосы амплитуды, (д) распределение фазы при радиусе кривизны границы $r_0 = 10\,\mu m$, (е) вихри ППП в выделенной области, $r_0 = 10\,\mu m$; значения по осям $(x, y)$ отложены в микрометрах.*

На основе управления вихревой решеткой ППП и детектирования ближнего поля вихрей можно реализовать плазмонные логические элементы «И» и «НЕ» для процессоров, работающих на оптических частотах. Конструирование и реализация устройств плазмонной техники: генераторов ППП на основе спазеров [2,5], фильтров и логических элементов [3,4] для оптических процессоров, позволит создать компьютеры, работающие на оптических частотах.

Список публикаций:

*[1] Maier S. A. Plasmonics: Fundamental and Applications, New York: Springer Science+Bussines Media, 2007.*
*[2] Stockman M. I. // Optics Express. 2011. V. 19. No. 22. P. 22029.*
*[3] Shulika O. V., Sukhoivanov I. A., Contemporary Optoelectronics: Materials, Metamaterials and Device Applications. Dordrecht: Springer Science+Bussines Media, 2016.*
*[4] Dzedolik I. V., Pereskokov V. S. // Atmospheric and Oceanic Optics. 2017. V. 30. No. 2. P. 203.*
*[5] Gubin M. Yu., Shesterikov A. V., Karpov S. N., Prokhorov A. V // Physical Review B. 2018. V. 97. 085431.*

## Синтез пленочных структур оксид меди-sp1 углерод для создания газовых сенсоров

***Петров Илья Александрович***
***Смирнов Александр Вячеславович, Царева Екатерина Руслановна, Васильев Алексей Иванович, Столбов Даниил Олегович***
*Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова*
*Кочаков Валерий Данилович, к.т.н.*
fizteh21@yandex.ru

Перспективным представляется поиск новых наноструктурированных широкозонных полупроводниковых пленок для газовой сенсорики. В 1962 году Seiyama et al. обнаружив изменение электропроводности тонкой пленки ZnO при наличии в воздухе химически активных газов [1]. С тех пор в литературе сообщалось о различных типах чувствительных материалов: от $SnO_2$, ZnO, $TiO_2$, $WO_3$, $In_2O_3$ до CuO, $Fe_2O_3$, NiO и $Y_2O_3$ [2]. В последнее время CuO используется для улучшения реакции газовых датчиков на обычные оксиды металлов, такие как $SnO_2$, ZnO и т.д. Пригодность CuO в качестве однородного

чувствительного материала является одной из текущих проблем исследований. CuO является полупроводниковым материалом p-типа. Использование CuO в качестве гомогенной чувствительной пленки для определения $CO_2$ впервые описано в [3]. В работе [4] на Si-подложках магнетронным распылением получены наноструктуры на основе CuO исследованы их электрические характеристики в парах метанола ($CH_3OH$) и этанола ($C_2H_5OH$). Время отклика полученных сенсоров (при воздействии метанолом) при концентрации 500 ppm составляет 375с, время восстановления 125 с.). Согласно исследованию [5] дегидрирование $CH_3OH$ / $C_2H_5OH$ приводит к образованию H / $H_2O$ и CO / $CO_2$. $\hbar\omega$

**Методика изготовления образцов**

На стеклянные и кремниевые подложки n-типа проводимости методом терморезистивного испарения в вакууме на вакуумной установке «УВР-3М» при давлении порядка $10^{-2}$ Па осаждались пленки меди, затем в печи МИМП-ВМ образцы отжигались в атмосфере воздуха при различных температурах и времени обжига. Во второй серии на подложки производилось напыление пленок меди и затем ионно-плазменным синтезом осаждались пленки линейно-цепочечного углерода (ЛЦУ) [6]. Определена оптическая ширина запрещенной зоны был по графику зависимости $(\alpha\hbar\omega)^2$ от $\hbar\omega$, где α – коэффициент поглощения, а $\hbar\omega$ - энергия фотона оксида меди разной стехиометрии. CuO и CuO/ЛЦУ, полученный термообработкой $350^0$C-20 мин. 2,02 и 2,16 эВ; $Cu_2O$ и $Cu_2O$/ЛЦУ, полученный термообработкой $250^0$C-20 мин. 2,35 и 2,45 эВ. Для измерения вольт-амперных характеристик (ВАХ) на воздухе и в атмосфере паров метанола и этанола использовался цифровой програмируемый мультиметр Kethley и закрытый объем, который насыщался парами спирта. Ниже представлены результаты измерений ВАХ и чувствительность на пары метанола и этанола при комнатной температуре (приведены в таблице). Под чувствительностью принимается величина S=[(Rgas – Rair)/Rair] × 100%. Синтезированные гетероконтакты n-Si/p-CuO реагируют в большей степени на метанол, чем на этанол. Структуры n-Si/p-CuO+ЛЦУ практически не реагировали на пары этанола, при этом электрическое сопротивление изменялось в парах метилового спирта, что позволяет дифференцировать наличие того или иного спирта. Время восстановления составило менее 10 сек.

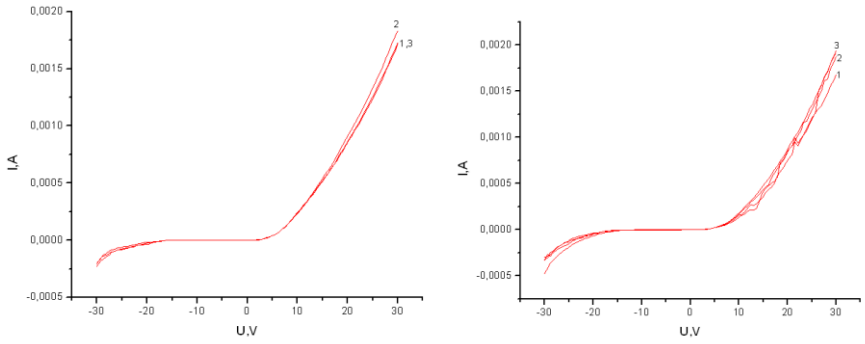



*рис. 1 (a) – ВАХ n-Si/CuO на воздухе (1); (2), (3)- в парах С3НОН 7500 и 15000 ppm ; (b) – ВАХ n-Si/CuO на воздухе (1), (2) – (3)*

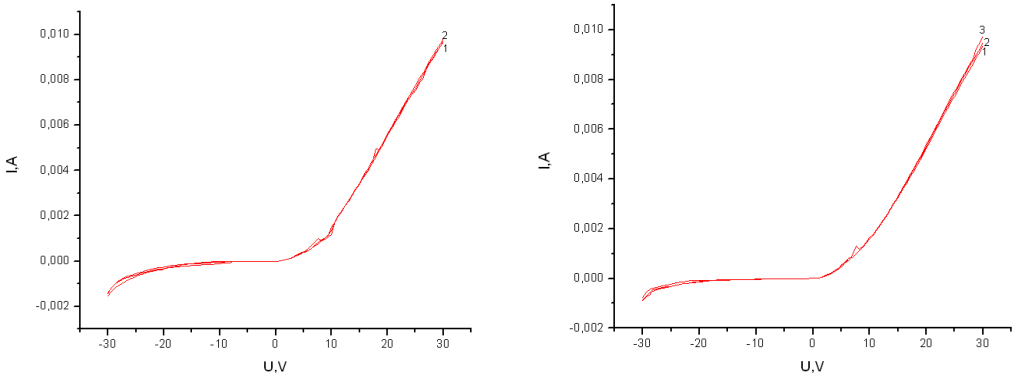



*рис. 2 (a) – ВАХ n-Si/CuO на воздухе (1); (2), (3)- в парах С3НОН 7500 и 15000 ppm ; (b) – ВАХ n-Si/CuO на воздухе (1), (2) – (3)*

*Таблица - 1*

| Образец | Концентрация паров CH3OH, ppm | Концентрация паров C2H5OH | Чувствительность к парам метилового спирта, % | Чувствительность к парам этилового спирта, % |
|---|---|---|---|---|
| CuO | 7500 | 870 | 9 | 6 |
| CuO | 15000 | 2600 | 16 | 5 |
| CuO/ЛЦУ | 7500 | 870 | 1 | 1 |
| CuO/ЛЦУ | 15000 | 2600 | 4 | 1 |

Список публикаций

*[1] T. Seiyama, A. Kato, K. Fujiishi and M. Nagatani, "A new detector for gaseous components using semiconducting thin films", Anal. Chem., Vol. 34, 1962, pp. 1502–1503.*

*[2] G. Korotcenkov, "Metal oxides for solid-state gas sensors: What determines our choice?", Mater. Sci. Eng. B, Vol. 139, 2007, pp. 1–23*

*[3] T. Ishihara, M. Higuchi, T. Takagi, M. Ito, H. Nishiguchi and Y. Takita, "Preparation of CuO thin films on porous BaTiO3 and application as a CO2 sensor", J. Mater. Chem., Vol. 8(9) 1998, pp. 2037–2042.*

*[4]Mitesh Parmar and K.Rajanna, Copper (II) Oxide Thin Film for Methanol and Ethanol Sensing. INTERNATIONAL JOURNAL ON SMART SENSING AND INTELLIGENT SYSTEMS, VOL. 4, NO. 4, DECEMBER 2011. pp. 710-725*

*[5] E. M. Cordi, P. J. O'Neill and J. L. Falconer, "Transient oxidation of volatile organic compounds on a CuO/Al2O3 catalyst", Appl. Catal. B, Vol. 14, 1997, pp. 23–36*

*[6] Патент Российской Федерации на изобретение. Регномер 2012122906 от 04.06.2012. «Способ получения металлсодержащего углеродного наноматериала». Авторы Смирнов А.В., Васильев А.И., Кочаков В.Д., Бобыль А.В., Теруков Е.И.*

## Кристаллохимические условия выращивания монокристаллов тригональных ферроборатов $SmFe_3(BO_3)_4$

***Петрова Светлана Дмитриевна***

***Гудим Ирина Анатольевна***

*Сибирский федеральный университет*

*Гудим Ирина Анатольевна к.ф.-м.н.*

*i02060517@yandex.ru*

В последнее годы активно исследуются физические свойства мультиферроиков семейства ферроборатов $ReFe_3(BO_3)_4$, где Re = La – Lu [1]. Это связано с наблюдением в них большого магнитоэлектрического эффекта, позволяющего управлять диэлектрическими свойствами таких веществ внешним магнитным полем. Среди исследованных редкоземельных ферроборатов соединение $SmFe_3(BO_3)_4$ выделяется тем, что в магнитоупорядоченной фазе имеет спонтанную электрическую поляризацию и имеет максимальную величину электрической поляризации (около 500 мкКл/м$^2$) возникающей в магнитных полях до 60 кЭ [2,3].

Специфической особенностью строения этих кристаллов являются геликоидальные цепочки октаэдров $FeO_6$. В кристалле могут присутствовать цепи, закрученные как влево, так и вправо. Соотношение количества правого и левого энантиотропов существенно влияет на свойства выращенных кристаллов [4].

Для выращивания кристаллов использовался раствор-расплав на основе вольфрамата лития:

78% вес. ($Li_2WO_4 + 3B_2O_3 + 0{,}4Sm_2O_3$ )+ 22 %вес. $SmFe_3(BO_3)_4$.

Раствор-расплав массой 150 г готовился при T=1000 $^0$C в платиновом цилиндрическом тигле (D=100мм, H=90мм) сплавлением смеси окислов[$Li_2O$, $WO_3$ , $B_2O_3$, $Sm_2O_3$, $Fe_2O_3$] в соотношении, определяемом выше приведённой формулой. Тигель устанавливался в кристаллизационную печь, где температура уменьшалась от дна тигля с вертикальным градиентом 1-2$^0$C/см. Раствор-расплав гомогенизировался при T=1000$^0$C за 24 часа. Для поддержания однородности раствор-расплав перемешивался.

Области стабильности кристаллов $SmFe_3(BO_3)_4$, а также соотношения компонентов растворов-расплавов были определены методом прямого фазового зондирования. Температура насыщения определялась с точностью ±2 $^0$C с помощью пробных кристаллов, которые предварительно получали из того же раствора-расплава в условиях спонтанного зарождения на вращающийся платиновый кольцевой держатель. Ширина метастабильной зоны $\Delta T_{мет} \approx 12$ $^0$C определялась как максимальное переохлаждение, при котором не было зарождения за 20- часовой период времени.

Для получения затравок кристаллов $SmFe_3(BO_3)_4$использовался метод ограничения числа затравок зарождением в тонком слое раствора-расплава. Для этого после определения параметров кристаллизации в раствор-расплав при температуре гомогенизации погружаем стержень и включаем вращение со скоростью 40 об/мин. Через 2 часа температура раствора-расплава понижается на 5-7$^o$C ниже температуры насыщения. Еще через 2 часа приподнимаем стержень в более холодную зону камеры печи (температура на 10-15$^o$C ниже температуры насыщения). При этом в тонком слое раствора-расплава, оставшемся на стержне, происходит образование небольшого числа зародышей. Их число невелико, так как в малом объеме оставшегося раствора-расплава концентрация кристаллообразующих окислов резко падает. Зарождение проходит в течение 1 часа. Затем стержень вновь загружается в раствор-расплав и затравки разращиваются в течение суток. Затем стержень извлекается из печи. Остатки раствора-расплава удаляются кипячением в 20% водном растворе азотной кислоты. Выросшие кристаллы-затравки снимаются со стержня и используются в дальнейшем для выращивания крупных кристаллов.

После этого 4 визуально качественных затравки закреплялись на платиновом стержневом держателе. Держатель с затравочными кристаллами подвешивался над раствором-расплавом при температуре гомогенизации. Держатель погружался в раствор-расплав при температуре $T=T_{нас}+7^0C$ и включалось реверсивное с периодом 1мин вращение со скоростью $\omega$=30 об/мин. Через 15 мин температуру понижали до $T=T_{нас}-7^0C$. Далее температура раствора-расплава снижалась с нарастающим темпом 1-3$^0$C в сутки, так чтобы скорость роста кристаллов не превышала 0,5 мм в сутки. Рост продолжался 9-10 дней. После завершения процесса роста кольцо приподнималось над поверхностью раствора-расплава и охлаждалось до комнатной температуры со скоростью не более 100 $^0$C/час. В результате вырастали кристаллы размером 5-7 мм.

Для выращенных кристаллов были измерены соотношения левых и правых энантиомеров.

Работа была частично финансово поддержана грантами РФФИ № № 17-52-45091 ИНД_а, № 18-42-240011 р_а и № 18-02-00696.

Список публикаций:

*[1]А.М. Кадомцева, Ю.Ф. Попов, Г.Н. Воробьев, А.П. Пятаков, С.С. Кротов, К.И. Камилов, В.Ю. Иванов, А.А. Мухин, А.К. Звездин, Ф.М. Кузьменко, Л.Н. Безматерных, И.А. Гудим, В.Л. Темеров, ФНТ 36, 640 (2010) [Low Temp. Phys. 36, 511 (2010)].*
*[2]А.А. Мухин, Г.П. Воробьев, В.Ю. Иванов, А.М. Кадомцева, А.С. Нарижная, А.М. Кузьменко, Ю.Ф. Попов, Л.Н. Безматерных, И.А. Гудим, Письма в ЖЭТФ 93, 305 (2011) [JETP Lett. 93, 275 (2011)].*
*[3]Ю.Ф. Попов, А.П. Пятаков, А.М. Кадомцева, Г.П. Воробьев, А.К. Звездин, А.А. Мухин, В.Ю. Иванов, И.А. Гудим, ЖЭТФ 138, 226 (2010) [JETP 111, 199 (2010)].*
*[4]I.A. Gudim, E.V. Eremin, V.L. Temerov, Journal of Crystal Growth 312 (2010) 2427–2430.*

## Рентгенофазовый анализ пленок $In_2S_3$ после плазменной обработки

***Пипкова Анна Сергеевна***
*Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова*
*Зимин Сергей Павлович, д.ф.-м.н.*
anna_pipkova@mail.ru

Пленки сульфида индия ($In_2S_3$) являются перспективными материалами для разработки солнечных бескадмиевых элементов. Целью данной работы являлось изучение пленок $In_2S_3$ после модификации поверхности в плазме. Исследования проводились на образцах сульфида индия, полученных методом термического испарения на стеклянных подложках при вариации температур подложки ($T_s$=200°C÷350°C) и отжига ($T_a$=200°C÷300°C). Рассмотрим влияние плазменной обработки на изменение морфологии поверхности примере двух типичных образцов: $In_2S_3$ без предварительного отжига ($T_s$=200°C, аморфная пленка) и $In_2S_3$ после предварительного отжига ($T_s$=300°C, $T_a$=250°C, поликристаллическая пленка). Пленки были подвержены обработке в аргоновой плазме. Обработка образцов проводилась в следующих режимах: энергия ионов ~25 эВ, t = 30 с и энергия ионов 200 эВ, t=30 с. Анализ морфологии пленок $In_2S_3$ показал, что в результате плазменной обработки ионами малых энергий 25 эВ на поверхности пленок появляется ансамбль наноструктур (нанокапель). При увеличении энергии ионов аргона до 200 эВ происходит увеличение размеров выступов. Независимо от предварительной обработки пленок, общие изменения морфологии поверхности при обработке ионами с энергией 25 и 200 эВ являются одинаковыми. На рис.1 представлена морфология пленок $In_2S_3$ в исходном состоянии (рис.1, a, c) и после обработки в аргоновой плазме при энергии ионов 200 эВ (рис.1, b, d).

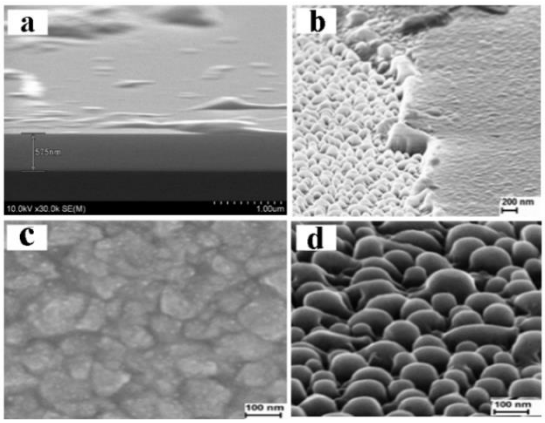



*рис.1. Морфология поверхности пленок $In_2S_3$ с аморфной (a, b) и поликристаллической (c, d) структурой: a,c - исходное состояние; b,d - после плазменной обработки*

Для анализа природы возникающих наночастиц был проведен рентгенофазовый анализ. Рентгеноструктурный анализ образцов $In_2S_3$ был проведен с помощью рентгеновского дифрактометра ARL X'tra (излучение Cu $_{K\alpha}$, $\lambda = 1.54$ Å, диапазон углов $15° \leq 2\theta \leq 45°$, шаг 0.02°, время экспозиции 1 с). На рис. 2 представлены рентгеновские дифрактограммы плёнок после плазменной обработки. Нижняя кривая соответствует пленке $In_2S_3$ в аморфном состоянии после обработки в аргоновой плазме, верхняя – поликристаллическому состоянию после обработки в аргоновой плазме.

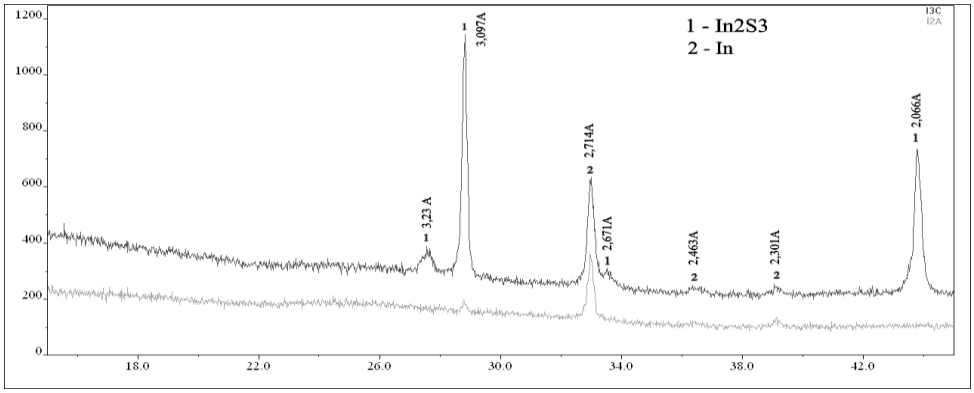



*рис.2. Рентгеновские дифрактограммы пленок $In_2S_3$ после плазменной обработки*

Анализируя нижнюю кривую, можно говорить как о частичной кристаллизации аморфной структуры, так и о появлении рефлексов от фазы чистого индия. На верхней кривой регистрируются пики от кубической фазы $In_2S_3$ и фазы индия. На исходных образцах индий не регистрировался.

Таким образом, рентгенофазовый анализ показал, что в результате плазменной обработки на поверхности пленок $In_2S_3$ появляется фаза индия, что подтверждается дополнительно методами комбинационного рассеяния и энергодисперсионного анализа. Нами была предложена модель появления индиевых капель на поверхности пленки. При распылении пленки $In_2S_3$ в аргоновой плазме появляются молекулы $In_2S$ и $S_2$. Энергии иона аргона, которую он может передать при столкновении молекулам $In_2S$ и $S_2$, достаточно, чтобы они диссоциировали на атомы индия и серы. В результате сера улетучивается, а индий осаждается на поверхность плёнки в форме капель. В работе проводится анализ размеров областей когерентного рассеяния в сравнении с данными электронной микроскопии.

Автор выражает признательность И.И. Амирову, С.В. Васильеву за помощь в проведении экспериментальных работ. Исследования выполнены на оборудовании ЦКП «Диагностика микро- и наноструктур».

Список публикаций:

*[1] Пипкова А.С. // Сборник материалов VI Научно-практической конференции с международным участием «Наука настоящего и будущего» для студентов, аспирантов и молодых ученых, 2018, ЛЭТИ, Санкт-Петербург – С.614-617*

*[2] Пипкова А.С. // Сборник материалов молодежной научно-практической конференции «Путь в науку. Физика», 2018, ЯрГУ, Ярославль, С.21-22*

*[3] Пипкова А. С., Зимин С. П., Мазалецкий Л. А. // Сборник материалов всероссийской научно-практической конференции «Актуальные вопросы науки в 21 веке», 2018, ЯрГУ, С. 136-137*

*[4] Пипкова А.С. // Сборник материалов VIII международной молодежной научной конференции «Наноматериалы и нанотехнологии: проблемы и перспективы», 2018, СГТУ имени Гагарина Ю.А., Саратов, С. 208-212*

## Влияние допирования на электронные свойства графеновых нанолент

***Пономарев Владислав Валериевич***
*Северо-Восточный федеральный университет им. М.К. Аммосова*
*Шарин Егор Петрович, к.ф.-м.н.*
pon_slav@mail.ru

Все электронные устройства в процессе своего развития имеют тенденцию к миниатюризации, соответственно, приходится искать новые компактные материалы наноэлектроники. Графеновые наноленты представляют собой вполне подходящий материал для изготовления транзисторов, являющихся стандартными узлами всех микросхем. При этом транзисторы на их основе могут с успехом работать даже при комнатной температуре, в то время как предшествующие разработки функционировали только при низких температурах в силу своей большей толщины. Поскольку свойства графеновых нанолент сильно зависят от их геометрических параметров (толщина, ширина, типа краев zigzag или armchair), химические и структурные модификации нанолент могут резко изменить их производительность

В данной работе с помощью квантово-химических методов были детально исследованы электронные свойства нанолент типа зигзаг (ZGNR) допированные атомами азота.

Все вычисления проводились с использованием программы Quantum Espresso. В основе лежит метод псевдопотенциала с использованием плоских волн в рамках теории функционала плотности (DFT). Влияние остовных электронов учитывалось путем использования ультрамягких псевдопотенциалов. Использовался нелокальный обменно-корреляционный функционал в параметризации Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). Энергия обрезания плоских волн для самосогласованного расчета составляла ϴ0 Ry. Для интегрирования линейной зоны Бриллюэна была использована сетка 9x9x1 в обратном пространстве. Для вычисления электронной структуры монослоя использовалась изолированная плоская структура. Во избежание взаимодействия между слоями расстояние между ними устанавливалось равным 15 Å.

Рассчитаны зонная структура и плотность состояний графеновых нанолент типа зигзаг, допированных атомами азота.

## Магнитоупругие эффекты в тригональных слабых ферромагнетиках

***Прилепский Дмитрий Юрьевич***
***Селезнева Кира Андреевна, Стругацкий Марк Борисович***
*Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт*
*Физико-технический институт*
*Стругацкий Марк Борисович, д.ф.-м.н.*
rockaroller@mail.ru

Монокристаллы тригональных легкоплоскостных антиферромагнетиков со слабым ферромагнетизмом обладают рядом особых свойств, не присущих другим материалам. Речь, в частности, идет о наблюдаемых в них магнитоакустических эффектах. В относящемся к этому классу борате железа, $FeBO_3$, обнаружено и исследовано магнитное линейное двулучепреломление поперечного звука [1] - акустический аналог оптического эффекта Коттона-Мутона. Суть обнаруженного эффекта состоит в том, что распространяющаяся линейно поляризованная звуковая волна, взаимодействуя с магнитной подсистемой, преобразуется в эллиптическую на выходе из кристалла. Причиной двойного преломления акустической волны является зависимость эффективных упругих констант кристалла, определяющих скорость звука, от приложенного магнитного поля [2].

Одна из целей настоящей работы состояла в теоретическом исследовании влияния магнитной подсистемы кристалла бората железа и внешнего магнитного поля на акустические волны различных поляризаций, распространяющиеся в образце. Исследован, в частности, характер трансформации в этих условиях звука с круговой и эллиптической поляризацией. Определены параметры, существенные для такой трансформации. Практический результат исследования заключается в принципиальной возможности создания на основе монокристаллов бората железа устройств нового поколения - магнитоакустических преобразователей, поляризаторов звука, датчиков магнитного поля и давления.

Помимо прочего, борат железа интересен с точки зрения создания ячеек магнитной памяти, что обусловило разработку технологии и синтез тонкой магнитной пленки бората железа на изоструктурной диамагнитной подложке бората галлия $GaBO_3$ [3]. В работе [4] выполнено исследование методом антиферромагнитного резонанса (АФМР) синтезированных магнитных пленок, а также монокристаллических

образцов бората железа. Экспериментально обнаружено, что при комнатной температуре величина изотропной энергетической щели низкочастотной ветви АФМР исследуемой пленки значительно превосходит ту же величину для массивного монокристалла [4]. Еще одна задача нашей работы состояла в поисках причин такого расхождения. Его удалось интерпретировать при учете магнитоупругого взаимодействия и механических напряжений, возникающих в пленке из-за рассогласования параметров кристаллических решеток пленки и подложки. В результате теоретического анализа определена зависимость изотропной щели от величины механического напряжения в пленке. Сравнение расчетной величины щели с экспериментально найденным значением ($3.37\,кЭ^2$ при 300 К) позволило определить эффективное давление в пленке, вызываемое ее контактом с подложкой $-2.19\cdot10^8\,дин/см^2$. Рассчитана также величина щели для массивного монокристалла бората железа (без учета давления). Она оказалась равной $0.42\,кЭ^2$ при 300 К, что находится в удовлетворительном согласии с экспериментально найденным значением.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект «мол_а» № 18-32-00210.

Список публикаций:

*[6] М.Б. Стругацкий, К.М. Скибинский. - Известия РАН. Серия физическая, 2010.- Т. 74, № 10, - С.1462–1464.*

*[7] Туров Е.А., Колчанов А.В., Меньшенин В.В. и др. Симметрия и физические свойства антиферромагнетиков. - М.: Физматлит, 2001. - 560с.*

*[8] С.В. Ягупов, М.Б. Стругацкий, Ю.А. Могиленец, К.А. Селезнева, Способ выращивания монокристаллической пленки FeBO3 на диамагнитной подложке. Пат. № 2616668 от 18.04.2017 г..*

*[9] Yagupov S.,Strugatsky M., Seleznyova K., Mogilenec Yu., Milyukova E., Maksimova E., Nauhatsky I., Drovosekov A., Kreines N., Kliava J. – Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2016. – V. 417. – P. 338 – 343.*

## Механизм образования химической связи и электронные свойства молекулы L-лизина

***Руденская Елизавета Александровна***

***Головко Ольга Владимировна, Оболонская Оксана Сергеевна***

*Кемеровский государственный университет*

*Оболонская Оксана Сергеевна, к.ф.-м.н.*

*lizaveta23071999@mail.ru*

Среди 20 основных аминокислот белков лизин является аминокислотой содержащей в алифатическом радикале дополнительную аминогруппу. В живых организмах встречается в виде L-изомера. L-лизин – незаменимая аминокислота, поскольку организм не может его синтезировать.

В данной работе для исследования электронной структуры молекулы L-лизина использовался комплекс программ CRYSTAL17 [1]. Расчеты были выполнены методом DFT с гибридным функционалом B3LYP [2, 3] и базисными наборами из [4]. Геометрия молекулы получена путем минимизации полной энергии и равнодействующих сил. Полученная структура молекулы L-лизина в свободном состоянии совпадает с общепринятой.

Электронная структура и химическая связь в молекуле L-лизина ранее не изучалась. Для анализа электронной структуры мы использовали карты электронных, разностных плотностей в различных плоскостях. (рис.1). На картах разностной плотности положительным значениям отвечают сплошные линии, отрицательным – пунктирные. На рис. 1 приведены карты электронных (слева) и разностных (справа) плотностей для функциональных групп молекулы L-лизина в различных плоскостях. На картах электронной плотности прослеживаются общие контурные линии, которые включают все атомы, лежащие в данной плоскости.

При исследовании механизма образования химической связи в функциональных группах молекулы L-лизина были вычислены эффективные заряды атомов. Так, эффективный заряд атома азота N3, атомов водорода H20 и H21, входящих в состав аминогруппы молекулы L-лизина, равны, соответственно, -0.555|e|, +0,246|e|, +0,240|e|, тогда как заселенности перекрывания $P_{N3\text{-}H20}$ = 0,342|e| и $P_{N3\text{-}H21}$ = 0,344|e| (e - заряд электрона).

На карте разностной (справа) плотности H20-N3-H21 молекулы L-лизина (рис 1 (в центре)) видно, что заряд вытекает из внешних областей атомов азота и водорода, и натекает на линии связи N3-H20 и N3-H21, образуя одновалентную группу - $NH_2$. Для аминогруппы, входящей в состав радикала молекулы L-лизина, образование химической связи происходит аналогично ($Q_{H22}$ = +0,229|e|, $Q_{H23}$ = +0,231|e|, $P_{N4\text{-}H22}$ = 0.342|e| и $P_{N4\text{-}H23}$ = 0,337|e|). В молекуле L-лизина эффективный заряд атома углерода C10 принимает положительное значение равное = +0,500|e|, это объясняется тем, что карбоксильная группа аминокислот обладает акцепторным эффектом и оттягивает на себя электронную плотность с атома азота аминогруппы. Заряды атомов в молекуле L-лизина $Q_{H24}$ = +0,323|e|, $Q_{O1}$ = -0,473|e| и $Q_{O2}$ = -0,432|e|, при этом заселенность

перекрывания между атомами кислорода O2 и углерода C10 ($P_{O2-C10}$ = 0,628|e|) превышает $P_{O1-C10}$ = 0,259|e|, а $P_{O1-H24}$ принимает значение 0,271|e|.

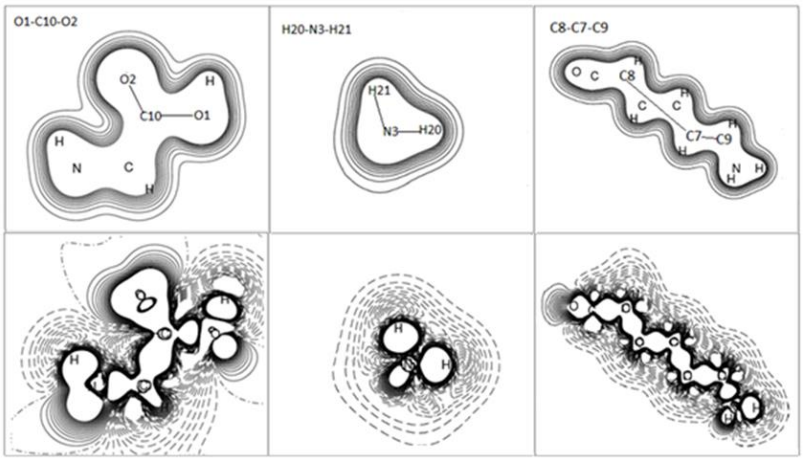



*рис.1. Карты электронной (сверху) и разностной (снизу) плотностей молекулы L-лизина в плоскостях O1-C10-O2 (слева), H20-N3-H21 (в центре), C8-C7-C9 (справа).*

В молекуле L-аргинина соответствующие заряды группы COOH: $Q_{H22}$ = +0,329|e|, $Q_{O1}$ = -0,471|e| и $Q_{O2}$ = -0,429|e|, заселенности перекрывания $P_{O1-H22}$ = 0,277|e|, $P_{O1-C11}$ = 0,287|e| и $P_{O2-C11}$ = 0,617|e|. На рис (справа) видно, что на линиях связи C-O и O-H наблюдается натекание заряда, что характерно для ковалентной связи. Таким образом, для карбоксильной группы аминокислот показано образование $\sigma_{p-p}$ связи между атомами углерода и кислорода.

Предложенный расчетный метод DFT с обменно-корреляционным функционалом B3LYP и базисами [5] хорошо описывает исследуемое соединение. Впервые была изучена электронная структура в молекуле L-лизина. Рассчитаны эффективные заряды атомов и заселенности перекрывания их с ближайшими соседями, а также карты распределения электронных и разностных плотностей для функциональных групп молекулы L-лизина в различных плоскостях. Показано, что в молекуле аминокислоты эффективный заряд атома углерода группы COOH принимает положительное значение, из-за акцепторного эффекта карбоксильной группы, которая оттягивает на себя электронную плотность с атома азота аминогруппы. Рассмотрен механизм образования $\sigma_{p-p}$ связи между атомами углерода и кислорода для карбоксильной группы аминокислоты.

Таким образом, результаты, полученные в данной работе, могут быть использованы для исследования физико-химических свойств комплексов, содержащих данную аминокислоту.

Список публикаций:

*[1] CRYSTAL17 / User's Manual. April 20, 2018 [Электронный ресурс]. / R. Dovesi, V. R. Saunders, R. Roetti et al. – Torino : University of Torino, 2018 – 461 p. – URL : http://www.crystal.unito.it/manuals/crystal17.pdf (Дата обращения: 22.10.2018).*

*[2] Becke, A. D. Density functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // J.Chem. Phys. – 1993. – V. 98. – N 7. – P. 5648 –5652.*

*[3] Lee, C. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density / C. Lee, W. Yang, R. G. Parr // Phys. Rev. B. – 1988. – V. 37. – N 2. – P. 785–789.*

*[4] CRYSTAL Basis Sets Library.*

*[5] Santosh Kumar. Spectroscopic studies of L-arginine molecule / Santosh Kumar, S B Rai // Indian Journal of Pure and Applied Physics. – 2010. – V. 48. – P. 251-255.*

## Влияние дефектов структуры на дисперсионные характеристики поляритонной 2D решетки туннельно связанных микропор, содержащих квантовые точки

***Рыбалка Алексей Евгеньевич***

*Донецкий национальный университет*

*Румянцев Владимир Васильевич, д.ф.-м.н.*

rybalka96@inbox.ru

**Введение.** Важным свойством фотонных структур с запрещенной зоной, рассмотренным в работе [1], является возможность получения так называемого "медленного" света. Особую **актуальность** это явление приобретает в связи с перспективой его применения при разработке устройств квантовой обработки оптической информации. В частности, эффективное уменьшение групповой скорости продемонстрировано в связанных

волноводных оптических резонаторах [2,3], различных типах твердотельных многослойных полупроводниковых структур [4]. Ключевую роль в уменьшении групповой скорости в подобных системах играют так называемые темные и светлые поляритоны, представляющие собой линейную суперпозицию фотонных состояний внешнего электромагнитного поля и макроскопических (когерентных) возмущений двухуровневой атомарной среды.

В настоящее время интенсивно развивается фотоника несовершенных структур. В частности, в работе [5] исследована дисперсия электромагнитных возбуждений в неидеальной решетке связанных микропор (микрорезонаторов), содержащих квантовые точки. Проведенные в рамках неидеальной фотоники исследования показали, что введением в исследуемую систему определенных дефектов или в результате управляемого внешнего воздействия можно добиться необходимого изменения энергетического спектра элементарных электромагнитых возбуждений и оптических свойств материала, обусловленных перестройкой исследуемой структуры.

**Цель** данной работы – исходя из представлений о поляритонных структурах [5], исследовать зависимость запрещенной фотонной зоны неидеальной топологически упорядоченной системы пор – туннельно связанных микрорезонаторов от концентрации дефектов структуры исследуемого массива.

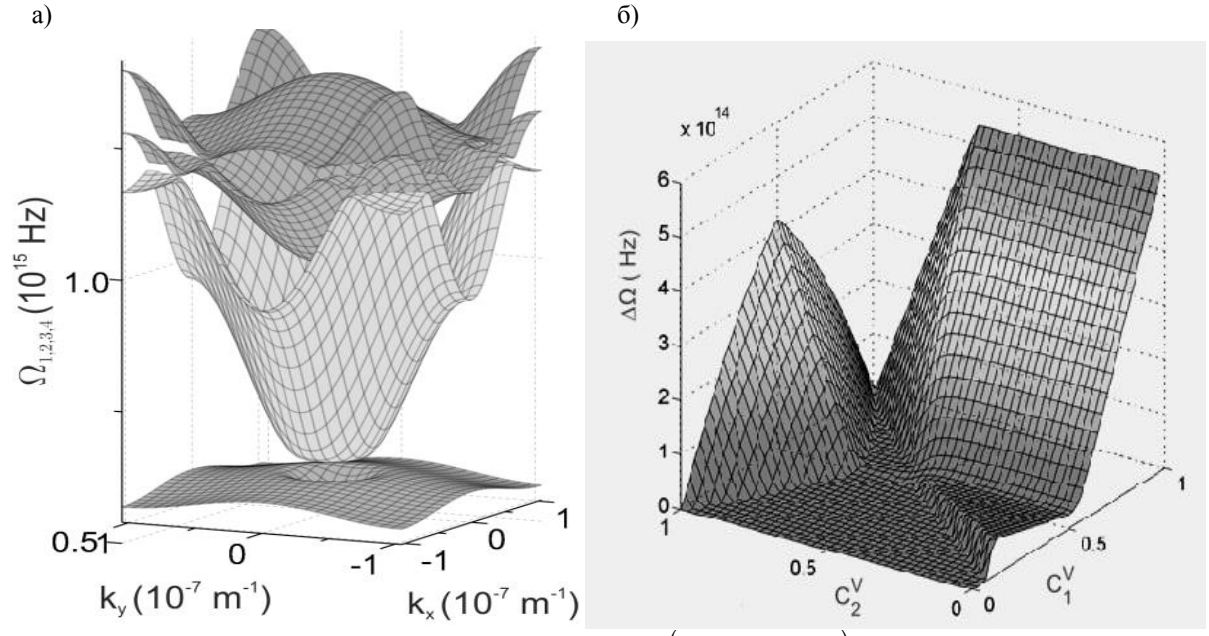



*рис.1. а) концентрационная зависимость дисперсии* $\Omega_{1,2,3,4}\left(k_x, k_y, C_1^V, C_2^V\right)$ *поляритонов в неидеальной 2D решетке микропор для* $C_1^V = 0.5$, $C_2^V = 0.25$ *; б) концентрационная зависимость* $\Delta\Omega\left(C_1^V, C_2^V\right)$ *запрещенной фотонной зоны неидеальной 2D решетки микропор между первой (нижайшей) дисперсионной поверхностью и следующей (см. рис.1а)*

**Результат.** В рамках приближения виртуального кристалла [6] выполнено численное моделирование спектра электромагнитных возбуждений в неидеальной 2D решетке связанных микропор, содержащих квантовые точки (атомарная подсистема). На *рис.1* представлены: (а) – закон дисперсии поляритонов $\Omega_{1,2,3,4}\left(k_x, k_y, C_1^V, C_2^V\right)$ в зависимости от концентрации $C_1^V$ дефектов, как в атомарной подсистеме решетки, так и в резонаторной $C_2^V$ ; (б) – концентрационная зависимость $\Delta\Omega\left(C_1^V, C_2^V\right)$ запрещенной фотонной зоны неидеальной 2D решетки микропор. Использованы модельные значения величин [5,7]. В качестве дефектов решетки микропор рассмотрены вакансии, их концентрация в первой и/или во второй подрешетках $C_{1(2)}^V$.

**Заключение.** В работе выполнено математическое моделирование зависимости величины запрещенной фотонной зоны неидеальной 2D решетки микропор от концентрации дефектов структуры. Показано, что в результате наличия структурных дефектов в квазидвумерном массиве можно добиться необходимого изменения энергетической структуры электромагнитных возбуждений и, следовательно, оптических свойств исследуемой системы, обусловленных перестройкой электромагнитного спектра. Этот вывод проиллюстрирован на конкретном примере 2D решетки микрорезонаторов, содержащихх квантовые точки.

Список публикаций:
*[1] Milonni P.W. // Fast Light, Slow Light and Left-Handed Light. Bristol: Institute of Physics Publishing. 2005.*
*[2] Yang Z.S. Stopping, storing, and releasing light in quantum-well Bragg structures/ Z.S. Yang, N.H. Kwong, R..Binder and A.L. Smirl // J. Opt. Soc. Am. 2005. V. B 22. P. 2144.*
*[3] Gersen H. Real-Space Observation of Ultraslow Light in Photonic Crystal Waveguides / H. Gersen, T.J. Karle, R.J.P. Engelen, W. Bogaerts, J.P. Korterik N.F. van Hulst, T.F. Krauss and L.Kuipers // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94. P. 073903.*
*[4] Turukhin A.V. Observation of Ultraslow and Stored Light Pulses in a Solid / A.V. Turukhin, V.S. Sudarshanam, M.S. Shahriar, J.A. Musser, B.S. Ham and P.R. Hemmer // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 88. P. 023602.*
*[5] Rumyantsev V.V., Fedorov S.A., Gumennyk K.V., Gurov D.A., Kavokin A.V. Effects of elastic strain and structural defects on slow light modes in a one-dimensional array of microcavities // Superlattices and Microstructures. 2018. V. 120. P. 642-649.*
*[6] Займан Дж. Модели беспорядка. – М: Мир, 1982. 592 с.*
*[7] Rumyantsev V.V. Fedorov S.A., Gumennyk K.V, Sychanova M.V., Kavokin A.V. Exciton-like electromagnetic excitations in non-ideal microcavity supercrystals // Nature. .Scientific Reports. 2014. №4. P. 6945.*

## Особенности магнитных и гальваномагнитных свойств сплавов Гейслера $Co_2YSi$ (Y=Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni)

***Семянникова Алена Александровна***
***Перевозчикова Юлия Александровна***
*Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН*
*Марченков Вячеслав Викторович, д.ф.-м.н.*
Semiannikova@imp.uran.ru

Синтез и изучение физических свойств полуметаллических ферромагнетиков (ПМФ) и спиновых бесщелевых полупроводников (СБП) представляет большой интерес, поскольку в таких материалах можно реализовать 100% спиновую поляризацию носителей заряда при комнатной температуре, что может найти практическое применение в устройствах и приборах спинтроники. Известно, что многие сплавы Гейслера относятся к классу ПМФ и СБП [1], а в соединениях $Co_2YSi$ (Y = Fe, Si) была обнаружена высокая поляризация по спину (см., напр., [2]). Поэтому интересно проследить за изменением электронных транспортных свойств сплавов системы $Co_2YSi$ при изменении Y-компоненты в ряду 3d-элементов периодической таблицы Менделеева.

В настоящей работе исследовались магнитные и гальваномагнитные свойства сплавов $Co_2YSi$ (Y = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni). Поликристаллические образцы были выплавлены в индукционной печи в атмосфере очищенного аргона. Затем они отжигались в течение 3 суток при 1100˚C (Me = V, Cr, Fe, Co) или в течение 9 суток при 800˚C (Me = Ti, Mn, Ni) в атмосфере аргона с последующим охлаждением до комнатной температуры. Структурная аттестация образцов показала, что отклонения от состава по отдельным элементам для всех изученных сплавов были не более 6,5% и все сплавы имеют упорядоченную структуру $L2_1$.

Было изучено электросопротивление в интервале температур от 4.2 до 300 K, а также полевые зависимости холловского сопротивления $\rho_H(H)$ и магнитосопротивления $\Delta\rho/\rho(H)$ при T = 4.2 K в полях до 100 кЭ. Для разделения нормального $R_0$ и аномального $R_s$ коэффициентов Холла, с последующей оценкой концентрации и подвижности носителей заряда, была также измерена низкотемпературная намагниченность в полях до 70 кЭ.

В результате проведенных исследований показано, что электросопротивление всех сплавов монотонно возрастает с температурой. При этом остаточное сопротивление $\rho_0$, нормальный и аномальный коэффициенты Холла, а также намагниченность насыщения $M_S$ немонотонно изменяются с изменением числа валентных электронов *z* в ряду от $Co_2TiSi$ до $Co_2NiSi$, т.е. от 26 до 32. Между значениями измеренных электрических и магнитных характеристик наблюдается сильная корреляция *(рис.1)*. Сделаны оценки концентрации носителей тока, которая оказалась типичной для металлов $10^{22}$-$10^{23}$ носит./см$^3$. Кроме того, при изменении *z* наблюдается степенная зависимость коэффициента аномального Холла от остаточного электросопротивления сплавов с показателем степени $k$ = 3.1, что не описывается существующими теоретическими представлениями, но коррелирует с экспериментальными данными, полученными на подобных системах сплавов Гейслера.

Установлено, что изменение Y-элементов в сплавах $Co_2YSi$ может приводить к изменениям электронной зонной структуры вблизи уровня Ферми $E_F$ и, следовательно, оказывать влияние на электронные, магнитные и гальваномагнитные свойства данных сплавов.

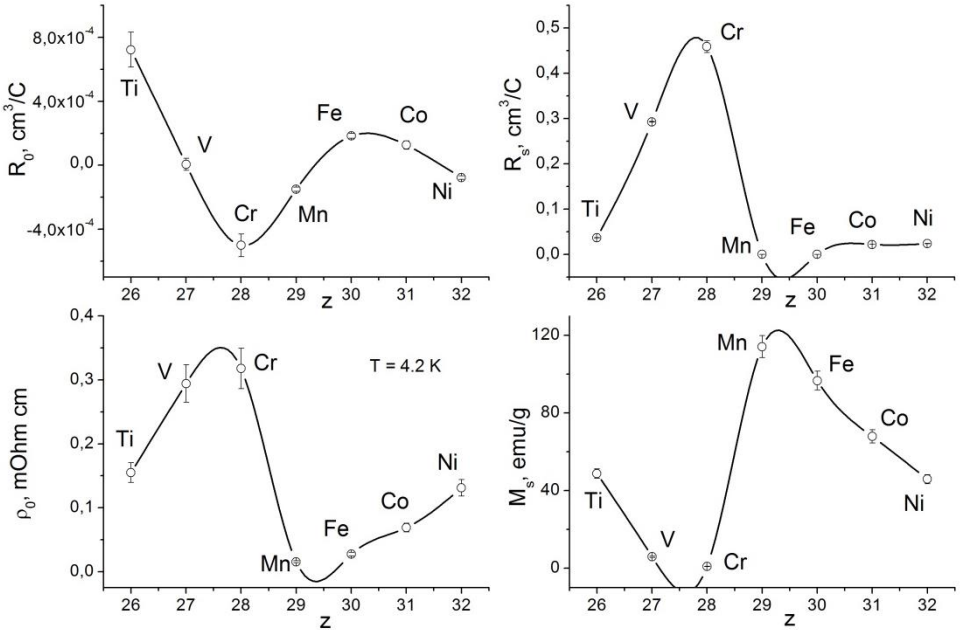



*рис.1. Зависимость $\rho_0$, $R_0$, $R_S$, $M_s$ от числа валентных электронов z*

Работа выполнена в рамках государственного задания ФАНО России (темы «Спин», № АААА-А18-118020290104-2) при частичной поддержке РФФИ (проекты № 18-02-00739 и № 18-32-00686), Комплексной программы УрО РАН (проект № 18-10-2-37) и Правительства РФ (постановление № 211, контракт № 02.A03.21.0006).

Список публикаций:

*[1] V.V. Marchenkov et al. // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2017. V. 459. P. 211.*
*[2] M. Jourdan et al. // Nature communications. 2014.V. 5. P. 3974.*

## Переохлаждение расплавов Fe – Co (до 20 ат.% Co)

***Смагина Елизавета Александровна***
*Удмуртский государственный университет*
*Камаева Лариса Вячеславовна, к.ф.-м.н.*
*elizaveta.smagina.97@mail.ru*

Величина переохлаждения является одним из основных параметров, определяющих процессы структурообразования при затвердевании из расплава, так как она зависит от исходной структуры жидкой фазы и управляет конкуренцией процессов зарождения и роста образующихся кристаллических фаз. В проведенных ранее исследованиях анализ концентрационных зависимостей переохлаждения (ΔT) систем Fe – Cr и Fe – Si позволил понять характер изменений в ближайшем атомном окружении железа при добавлении в него Cr и Si. Cr и Si в твердом состоянии стабилизируют ОЦК структуру Fe, но для однозначного ответа на вопрос о характере локального упорядочения атомов железа выше температуры плавления необходимо исследовать влияние примесей с различным химическим взаимодействием на физические свойства расплава железа. Поэтому в данной работе исследована концентрационная зависимость переохлаждения расплавов Fe – Co. В широкой области составов Fe и Co образуют твердые растворы с ГЦК решеткой. Сплавы Fe – Co относятся к классу магнитомягких материалов и применяются для изготовления сердечников и полюсных наконечников в электромагнитах и трансформаторах, роторов и статоров электродвигателей и генераторов, телефонных мембран. Помимо этого сплавы Fe – Co нашли свое применение в создании магнитопроводов в ультразвуковой аппаратуре высоких энергий, датчиков давления и т.д., а также рассматриваются как эффективные материалы для электродов при производстве водорода водно – щелочным электролизом.

Исходя из выше изложенного, перед данной работой была поставлена следующая цель – исследовать влияние Co на величину переохлаждения расплавов Fe – Co до 20 ат.% Co при кристаллизации в контейнере с небольшими скоростями охлаждения (до 1°C/c). Концентрационный интервал был выбран с учетом равновесной диаграммы состояния, согласно которой в интервале составов 16,5 – 19,5 ат. % Co в сплавах системы протекает перитектическая реакция L+δ-Fe(Co)→γ-Fe(Co).

Для определения величины переохлаждения использовался дифференциально – термический анализ (ДТА) на установке ВТА – 983. Для исследуемых образцов были проведены серии измерений, состоящие из нескольких циклов нагрев (плавление) – охлаждение (кристаллизация). В этих циклах варьировали или максимальную температуру, до которой нагревали расплав перед охлаждением, или скорость. Образцы охлаждались со скоростями 20 и 100°С/мин. Влияние температуры расплава на переохлаждение было изучено при термоциклировании образцов. В этих экспериментах каждый образец нагревали до температуры на 10 – 20°С выше температуры ликвидус, выдерживали при этой температуре в течение 20 минут, а затем охлаждали со скоростью 100°С/мин. В следующем цикле нагрев – охлаждение максимальную температуру расплава увеличивали на 20 – 30 °С и т.д. до 1680°С.

В результате проведенных исследований по термограммам нагрева установлено, что температуры фазовых превращений расплавов Fe – Co до 20 ат.% Co хорошо согласуются с линиями равновесной диаграммы состояния. Анализ кривых ДТА в режиме охлаждения и определенных из них величин переохлаждения, в условиях которых начиналась кристаллизация сплавов, показывает, что температура расплава оказывает сильное влияние на характер термограмм и величину переохлаждения. На полученных в двух независимых экспериментах при понижении и повышении температуры расплава температурных зависимостях переохлаждения наблюдается участок роста переохлаждения до 1600°С, и для большинства сплавов с содержанием кобальта менее 7 ат.% характер температурных зависимостей не зависит от режима измерений. Такой вид температурных зависимостей переохлаждения указывает на влияние температуры нагрева расплава над ликвидусом и на его склонность к образованию кристаллической фазы, что может быть вызвано термическими структурными превращениями в расплаве. При увеличении концентрации кобальта выше 7 ат.% в расплаве максимальная температура нагрева перестает влиять на величину переохлаждения, для этих сплавов кристаллизация даже при охлаждении от температур ниже 1600°С начинается в условиях высоких переохлаждений ~150°С.

Концентрационная зависимость переохлаждения, построенная с учетом значений ΔТ, полученных во всех проведенных экспериментах, в результате выраженного температурного влияния имеет большой разброс значений, более 250°С. Для выявления концентрационного влияния на переохлаждение независимо от температурного, принимая во внимание сложный характер полученных температурных зависимостей, были построены две независимые концентрационные зависимости переохлаждения для величин переохлаждения при охлаждении расплавов от температур до 1600°С и для температур выше 1600°С. Концентрационная зависимость ΔТ при охлаждении расплавов от температур до 1600°С построена до 7 ат.% Co. При небольших содержаниях Co (до 3 ат.%) кристаллизация начинается при переохлаждении ~100°С, затем в области от 3 до 4 ат.% Co переохлаждение падает до 50°С и при дальнейшей замене атомов железа атомами кобальта перестает изменяться. При охлаждении расплавов от температур выше 1600°С на концентрационной зависимости ΔТ до 5 ат.% Co включительно величина переохлаждения составляет ~ 175°С, при увеличении концентрации кобальта переохлаждение плавно уменьшается и при 8 ат.% Co составляет 150°С.

Полученные зависимости показывают, что при температурах менее 1600°С кристаллизационная способность ОЦК железа в 2 раза больше, чем при более высоких температурах, а также, что добавление кобальта в жидкое железо приводит к резкому увеличению кристаллизационной способности твердого раствора на основе ОЦК-Fe, однако, когда концентрация кобальта превышает 7 ат.%, твердый раствор на основе ОЦК решетки железа перестает образовываться. При температурах выше 1600°С концентрационные изменения в переохлаждении связаны с изменением типа образующихся кристаллов, в области до 5 ат.% Co из расплава образуется только твердый раствор на основе ОЦК-Fe, и наблюдаются высокие значения переохлаждения, слабо зависящие от концентрации кобальта в расплаве. В области концентраций где непосредственно из расплава начинает образовываться твердый раствор на основе ГЦК решетки железа наблюдается постепенное уменьшение переохлаждения.

Таким образом, после проведенных исследований переохлаждения расплавов Fe – Co до 20 ат.% Co при кристаллизации в контейнере с небольшими скоростями охлаждения (20 и 100 °С/мин) можно сделать вывод, что на величину переохлаждения наибольшее влияние оказывает температура, от которой охлаждается расплав. Концентрационное поведение величины переохлаждения имеет сложный характер и зависит от температуры расплава. Анализ температурного и концентрационного влияния на переохлаждение показывает, что в сплавах Fe-Co структурное состояние расплава наследуется от исходного твердого состояния. До 5 ат.% - это ОЦК подобный атомный ближний порядок, а при более высокой концентрации – ГЦК подобный. Однако при концентрациях расплава менее 7 ат.% в области 1600°С происходит структурное превращение, в результате которого при более высоких температурах также формируется ГЦК подобный атомный ближний порядок. Помимо этого низкотемпературное атомное упорядочение, также претерпевает концентрационное изменение. Учитывая полученные ранее данные для систем Fe-Cr и Fe-Si, можно полагать, что в области концентраций до 3 ат.% в расплаве при температурах ниже 1600°С реализуется локальное упорядочение промежуточное между ОЦК и ГЦК, которое в интервале концентраций от 3 до 4 ат.% переходит в ОЦК подобное.

Работа выполнена по теме НИР № гос. регистрации АААА–А17–117022250039-4.

# Изучение импульсных откликов ЯМР в двухспиновых системах

***Смирнова Анастасия Юрьевна***
*Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт*
*Сапига А.В., к.ф.-м.н.*
a.smirnovasbox@gmail.com

Ядерный магнитный резонанс (ЯМР) является одним из эффективных методов исследования структуры твердых тел. Спектр ЯМР двухспиновой системы в твердом теле представляет собой дублет Пейка [1], из анализа формы которого можно установить длину и ориентацию межъядерного вектора в кристалле. Также структурные параметры можно определить, вычисляя моменты линии ЯМР. Известны два основных метода регистрации спектра ЯМР: а) метод непрерывного прохождения через область резонансного поглощения, в этом случае непосредственно регистрируется спектр ЯМР; б) импульсный метод, при котором регистрируется спад свободной прецессии (ССП), из которого после преобразования Фурье можно восстановить спектр ЯМР. Непрерывный и импульсный методы обладают своими преимуществами и недостатками. Поэтому актуальным является поиск иных методов извлечения структурной информации получаемой методом ЯМР. Одним из которых может стать метод анализа формы импульсных откликов. Наиболее хорошо теория импульсных откликов разработана для солид-эха. Солид-эхо наблюдается в системах ядер с сильным диполь-дипольным взаимодействием после воздействия двух импульсов длительностью $\pi/2$, при этом фаза второго импульса должна быть сдвинута на $90^o$.

Согласно теории [2] форма затухания амплитуды солид-эха зависит от внутримолекулярных и межмолекулярных дипольных взаимодействий, которые в свою очередь определяются структурными параметрами. Для амплитуды солид-эха в [2] было получено выражение

$$E(2\tau) = V(2\tau) - exp(-m_2\tau^2)\left(\frac{m_2}{m_2+b^2}\right)[\sin(b\tau) - (b\tau)\cos(b\tau)]^2, \quad (1)$$

$$V(2\tau) = exp(-m_2\tau^2)[1 + m_2\tau^2\cos^2(b\tau)], \quad (2)$$

где $\tau$ – задержка между импульсами, $b = 3\gamma^2\hbar r^{-3}(1 - 3\cos^2\theta)/4$ – вклад от внутримолекулярных взаимодействий, $\gamma$ – гиромагнитное отношение, $\hbar$ – постоянная Планка, $r$ – расстояние между атомами, $\theta$ – угол между $r$ и направлением внешнего поля $\mathbf{B}_0$, $m_2$ – вклад во второй момент от межмолекулярных взаимодействий.

Для проверки этой методики были выбраны монокристаллы минералов натролита $Na_{16}[Al_{16}Si_{24}O_{80}]\cdot 16H_2O$ и гипса $CaSO_4\cdot 2H_2O$. В структуре этих кристаллов имеется всего две неэквивалентные позиции молекул воды, поэтому для аппроксимации экспериментальной зависимости необходимо взять суперпозицию из двух выражений (1). Аппроксимация проводилась по методу наименьших квадратов (*рис. 1*). Измерения выполнялись на импульсном когерентном спектрометре ЯМР на частоте 30 МГц. Полученные значения структурных параметров $b$ и $m_2$ для разных ориентаций кристаллов хорошо совпадают с данными работ [1] и [3]. В докладе обсуждается возможность изучения медленных молекулярных движений этим методом.

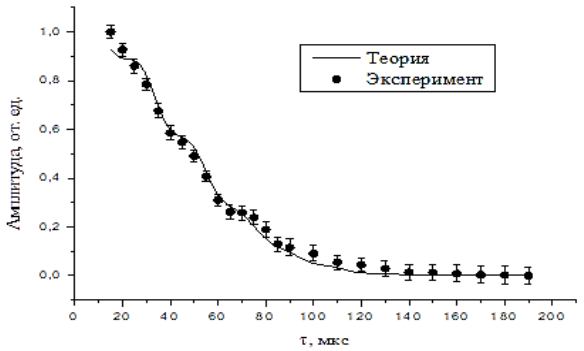



*рис.1. Зависимость амплитуды солид-эха в натролите, $\mathbf{B}_0$||[110].*

Предложенный метод может стать альтернативой классическому Пейковкому анализу в случае использования импульсного спектрометра ЯМР без использования преобразования Фурье.

Список публикаций:

*[1] Pake G. E. Nuclear resonance absorption in hydrated crystals: fine structure of the proton line // J. Chem. Phys. – 1948. - V.16. – P.327 - 336.*
*[2] Сергеев Н. А. Солид-эхо в кристаллогидратах / Н. А. Сергеев, А. В. Сапига, Д. С. Рябушкин // Укр. физ. журн. – 1990. – Т. 35, №3. – С. 434 - 437.*
*[3] Сапига А.В. Пейковский анализ структуры ромбического натролита А.В. Сапига, Н.А. Сергеев, В. Н. Щербаков // Жур. Струк. Химии. 1986.- Т.27, №4.- С.181-182.*

# Мёссбауэровские исследования структурных фазовых превращений в ферроборате $FeBO_3$ при высокотемпературном отжиге

***Снегирёв Никита Игоревич*[1]**

***Ягупов Сергей Владимирович*[1], *Стругацкий Марк Борисович*[1], *Могиленец Юлия Александровна*[1], *Селезнева Кира Андреевна*[1], *Старчиков Сергей Сергеевич*[2], *Любутин Игорь Савельевич*[2]**

[1]*Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт*

[2]*ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН*

*Стругацкий Марк Борисович д.ф.-м.н.*

niksnegir@yandex.ru

Отжиг кристаллов представляет интерес не только в качестве методики избавления от послеростовых напряжений в образцах, но и как способ трансформации кристаллических фаз. В настоящей работе проведена серия экспериментов по высокотемпературному отжигу монокристаллов $FeBO_3$, синтезированных нами методом из раствора в расплаве [1].

Отжиг проводился в воздушной среде при температурах 800 и 1000°C с различным временем выдержки. До и после проведения отжига были получены мёссбауэровские спектры образцов.

В спектрах отожженных образцов, помимо основной шестерки резонансных линий (секстета), характерной для исходного кристалла $FeBO_3$, появляются дополнительные линии, интенсивность которых увеличивается с ростом времени отжига (рисунок 1). Расчет параметров сверхтонкого взаимодействия показывает, что основная компонента со значением изомерного сдвига $\delta = 0.394\pm0.004$ мм/с, квадрупольного сдвига $\varepsilon = 0.188\pm0.004$ мм/с и магнитного поля на ядре железа $H_{hf}= 336.254\pm0.014$ кЭ отвечает ионам $Fe^{3+}$ в фазе бората железа $FeBO_3$ [2]. Параметры дополнительного секстета имеют значения $\delta = 0.370\pm0.018$ мм/с, $\varepsilon = -0.195\pm0.018$ мм/с и $H_{hf} = 516.61\pm0.25$ кЭ, что характерно для фазы гематита $\alpha$-$Fe_2O_3$ [3].

Кроме того, при сканировании поверхности отожженных образцов оптическим микроскопом обнаружены единичные микрокристаллы, размерами около 200 μm, по форме и цвету характерные для фазы $Fe_3BO_6$. Эта фаза не былf обнаружена методом мёссбауэровской спектроскопии, вероятно, ввиду очень малой концентрации.

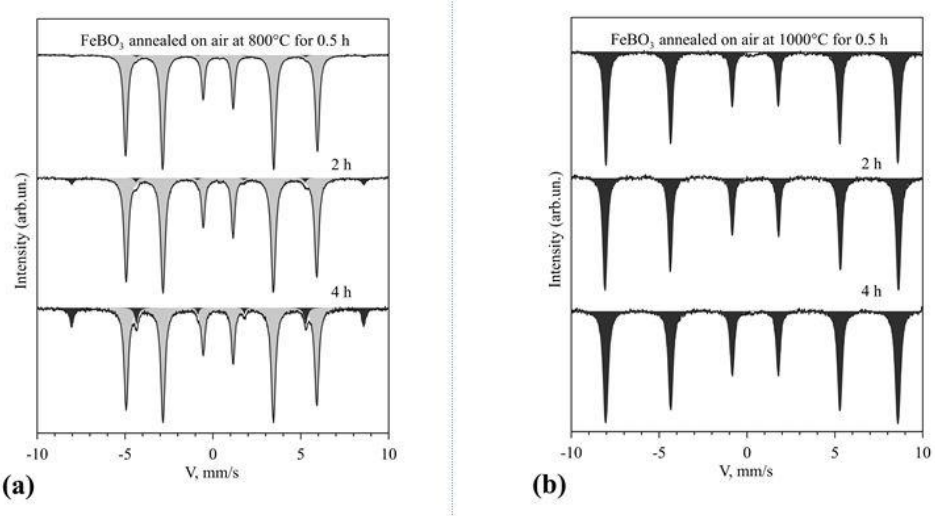



*рис. 1. Мёссбауэровские спектры FeBO3, отожженного при 800°C (а) и 1000°C (б) в течение 0.5, 2 и 4 часов (верхний, средний и нижний спектры, соответственно)*

Характер подобных структурных изменений определяется температурой и временем отжига.

Исследования выполнены при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-3200210 «мол_а») в части экспериментов по отжигу монокристаллов и Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН в части мёссбауэровских измерений.

Список публикаций:

*[1] Yagupov S., Strugatsky M., Seleznyova K., Mogilenec Yu., Snegirev N., Marchenkov N., Kulikov A., Eliovich Y., Frolov K., Ogarkova Yu. and Lyubutin I. // Cryst. Growth Des., 18(12), 7435 (2018)*

*[2] Snegirev N., Yagupov S., Strugatsky M., Seleznyova K., Mogilenec Yu., Marchenkov N., Kulikov A. Perunov I.,, Eliovich Y., Frolov K., Baskakov A., Ogarkova Yu. and Lyubutin I. // Abstracts of XV ICMSA, 50 (2018)*

*[3] Lyubutin I., Lin C., Korzhetskiy Yu., V. Dmitrieva T., and Chiang R. // J. Appl. Phys., 106, 034311 (2009)*

**Название докладаИсследование оптических свойств нанопленок углерода на стеклах. Метод магнетронно-распылительных систем**

***Солодухин Дмитрий Сергеевич***

*Новосибирский национальный исследовательский государственный университет*

*Золкин Александр Степанович, к.ф.-м.н.*

alkrommus@gmail.com, zolkinas@gmail.com

**Введение.** Углеродные алмазоподбные покрытия (УАП) выделяются среди остальных типов покрытий широким диапазоном свойств и способов применения. УАП прозрачны в видимом и инфракрасном диапазоне, для них характерны химическая стойкость, высокая твердость и теплопроводность, что делает их востребованным материалом в различных сферах [1,2]. Аморфные углеродные (a-C и a-C:H) пленки нашли применение в качестве просветляющих и защитных покрытий для солнечных элементов, оптики инфракрасного диапазона. Также существуют свидетельства применения аморфных углеродных покрытий в медицинских имплантатах, благодаря их антибактериальным свойствам [3]. Среди методов исследования структуры можно выделить спектроскопию комбинационного рассеяния света (КРС) [4], оптическую спектроскопию, методы исследования механических свойств: адгезия, твердость, износостойкость. В данной работе использован метод магнетронно-распылительных систем (МРС).

Целью является исследование оптических свойств пленок аморфного углерода на стеклах.

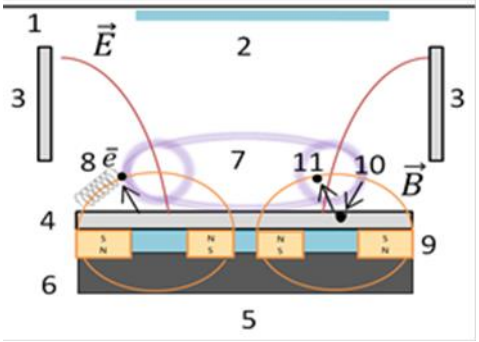



*рис. 1. Камера МРС: 1 – подложка, 2 – плёнка, 3 – анод, 4 – катод, 5 – система охлаждения катода, 6 – магнитопровод, 7 – область плазмы, 8 – электрон в скрещенных полях, 9 – система магнитов, 10 – Ar+, бомбардирующий мишень, 11 – выбитая частица вещества мишени*

**Методика.** Эксперименты проводились в вакуумной камере с «сухим вакуумом». Остаточное давление в камере до напыления - $10^{-5}$ Торр, рабочее давление после напуска аргона - $10^{-3}$ Торр, максимальный расход составлял 200 мл/мин. Напряжение на МРС изменялось в пределах от 300 В до 700 В. Для проведения экспериментов использовалась графитовая мишень. Пленки исследовались на спектрофотометре UV -3600, на атомно-силовом микроскопе и электронном сканирующем микроскопе. Свойства пленок исследовались в зависимости от времени напыления и толщины пленок в зависимости от внешних условий (например, в условиях 100% влажности или повышенной температуры), что важно для различных оптических систем (лазеры, бинокли, очки, мониторы и др.). Давление в камере измерялось с помощью Pfeiffer Vacuum PKR 251 Full Range Gauge Pirani, газовый поток измерялся с помощью системы Digital Mass Flow Controller SEC-Z500X Series – Horiba. В работе использовался источник напряжения *APEL-M-5PDC (Томск, Россия)*. Расход газа изменялся в пределах от 24% до 100%, максимальный расход составлял 200 мл/мин. Напряжение изменялось в пределах от 300 В до 700 В. Для проведения экспериментов использовалась графитовая мишень.

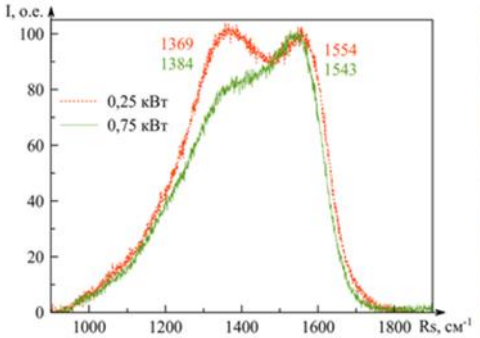



*рис. 2. Спектр КР пленка углерода на стекле К8*

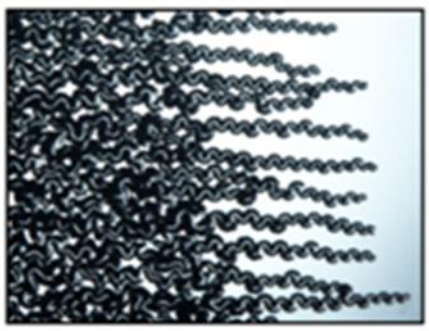


*рис. 3. Разрушение углеродной пленки на стекле К8*

**Результаты.** Исследованы вольт-амперные характеристики МРС. Им свойственны выраженный гистерезис в координатах напряжение на МРС – ток разряда. В результате определён режим для оптимального

напыления углеродного покрытия на стекла: ток = 1 – 3А, напряжение = 550 – 700 В, расход аргона не более 200 мл/мин. Исследованы спектры углеродного покрытия на стеклах (К-8, кварц) в диапазоне 200нм – 16мкм в зависимости от времени напыления и толщины покрытия. Получены данные о морфологии, шероховатости с помощью атомно-силового микроскопа. Установлено, что оптимальные условия: напряжение на МРС – ток разряда соответствуют U = 550 – 600 В, I = 1 – 2А. При больших значениях механические свойства покрытий несколько ухудшаются. При меньших значениях скорости роста покрытий слишком малы. На рис. 2 представлен спектр КР предварительного эксперимента по осаждению углерода на стекло К8[6]. При больших толщинах углеродного покрытия происходит его разрушение под действием механических напряжений, обусловленных тепловыми факторами при синтезе: отличием в коэффициентах теплового расширения (пленка – подложка), большой разностью температур между верхним слоем роста плёнки и её основанием на подложке ввиду высокой величины теплоты испарения - конденсации. На рис. 3 представлен пример разрушения пленки углерода на стекле.

**Выводы**. Твердо установлено, что вольт-амперные характеристики имеют гистерезис, а также на основании исследованных вольт-амперных характеристик получены покрытия углерода на стекле К8 и кварце.

**Благодарности.** Автор благодарит сотрудников лаборатории Александра А. Борисова и Сергея Ю. Чепкасова за помощь при проведении экспериментов. Работа проведена в рамках проекта НГУ топ-100 «Новая физика».

Список публикаций:

*[1] Кузьмичев А.И. Магнетронные распылительные системы. Кн. 1. Введение в физику и технику магнетронного распыления. – Киев: Аверс. – 2008. – 244 с.*

*[2] Рогов А. В., Капустин Ю. В., Мартыненко Ю. В. Факторы, определяющие эффективность магнетронного распыления. Критерии оптимизации // Журнал технической физики, 2015, том 85, вып. 2*

*[3] Ярош А. Л. и др. Исследование биосовместимости хирургических имплантатов нового поколения для пластики передней брюшной стенки //Фундаментальные исследования. – 2011. – №. 10-1.*

*[4] Горелик В. С. Комбинационное рассеяние света //Соросовский образовательный журнал. – 1997. – Т. 6. – С. 91-96.*

## Влияние диэлектрического окружения на изменение резонансной частоты локализованных плазмонов

***Томилина Ольга Андреевна***

***Бержанский Владимир Наумович, Томилин Сергей Владимирович***

*Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского, физико-технический институт*

olga_tomilina@mail.ru

Дискретные проводящие нанообъекты и наноструктурированные макроматериалы представляют собой перспективные материалы для создания сенсорных плазмонных структур. Взаимодействие электромагнитного поля с металлическими низкомерными объектами (наночастицами) определяется свойствами их электронной подсистемы. Для проводящих наночастиц с зонным характером энергетического спектра электроны проводимости представляют собой плазму с определённой резонансной частотой плазменных колебаний. Поглощение электромагнитных квантов на возбуждение резонансных плазмонов наблюдается в виде спектральных «провалов» на резонансной частоте. При этом диэлектрическое окружение проводящего нанообъекта оказывает существенное влияние на его свойства, в частности, на процессы переноса и релаксации энергетических возбуждений. Поэтому на базе плазмонной системы потенциально может быть построен сенсор для детектирования свойств диэлектрической среды. Следовательно, исследования в данной области являются актуальными и имеют большое фундаментальное и практическое значение.

В данной работе изучено влияние диэлектрического окружения на изменение резонансной частоты локализованных плазмонов. В качестве плазмонной системы использовалась сформированная на подложке из гадолиний-галлиевого граната (GGG) система самоорганизующихся наночастиц Au, полученная методом термоактивированной грануляции (отжиг при 950°C в течении 10 мин) напылённой термическим методом плёнки золота толщиной 5 нм. [1]. Для проведения исследований плазмонная система помещалась в кювету, которая заполнялась прозрачной диэлектрической средой. В качестве диэлектрического среды применялись материалы с различным показателем преломления (диэлектрической проницаемостью): воздух, дистиллированная вода, водный раствор NaCl (с массовой долей 4.17%, 7.14%, 11.11%) и глицерин. На рисунке 1 представлены спектры пропускания системы плазмонных наночастиц Au/GGG с различным диэлектрическим окружением.

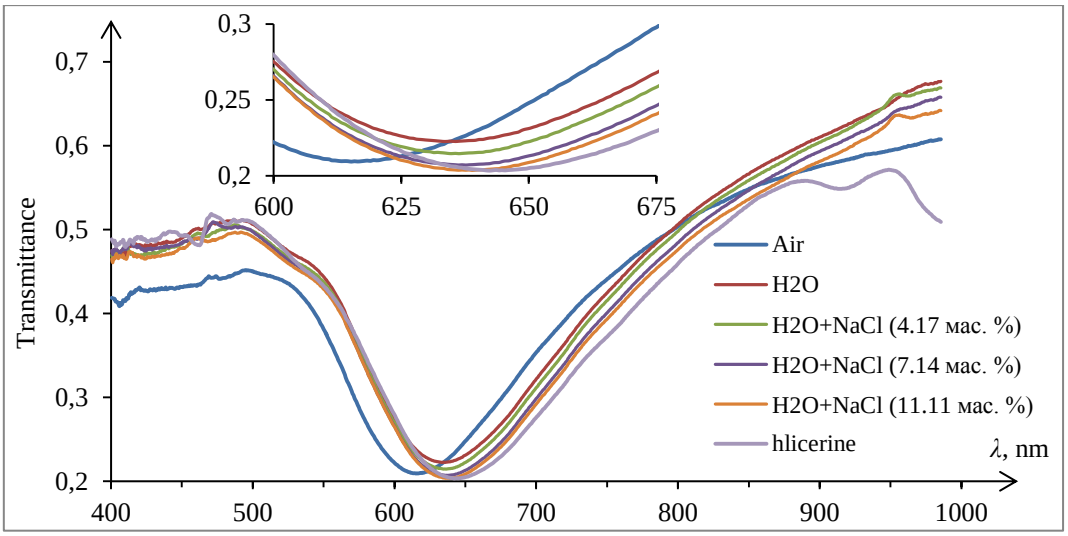



*рис.1. Спектры пропускания системы плазмонных наночастиц Au/GGG в средах с различной диэлектрической проницаемостью. На вставке показан увеличенный масштаб дна плазмонного «провала».*

Как видно из представленных спектров, минимум пропускания, который соответствует резонансной частоте локализованных плазмон-поляритонов, испытывает монотонное «красное» смещение с увеличением диэлектрической проницаемости окружающей среды. Видно, что увеличение ε окружающей среды от 1 для воздуха до 2.28 для глицерина приводит к смещению положения резонансного пика по длине волны на 28 нм.

Однако анализ смещения резонансного минимума непосредственно на спектрах пропускания связан с высокой погрешностью вследствие гладкого округлого дна провала. Гораздо более информативными в данном случае могут стать спектры производной dT/dλ. Спектральные зависимости первой производной от коэффициента пропускания для графиков на рис. 1 представлены на рис. 2. Как видно на представленных зависимостях точка перехода кривой через «ноль», чётко соответствует длине волны плазмон-поляритонного резонанса и может служить критерием оценки изменения состояния диэлектрического окружения плазмонной системы.

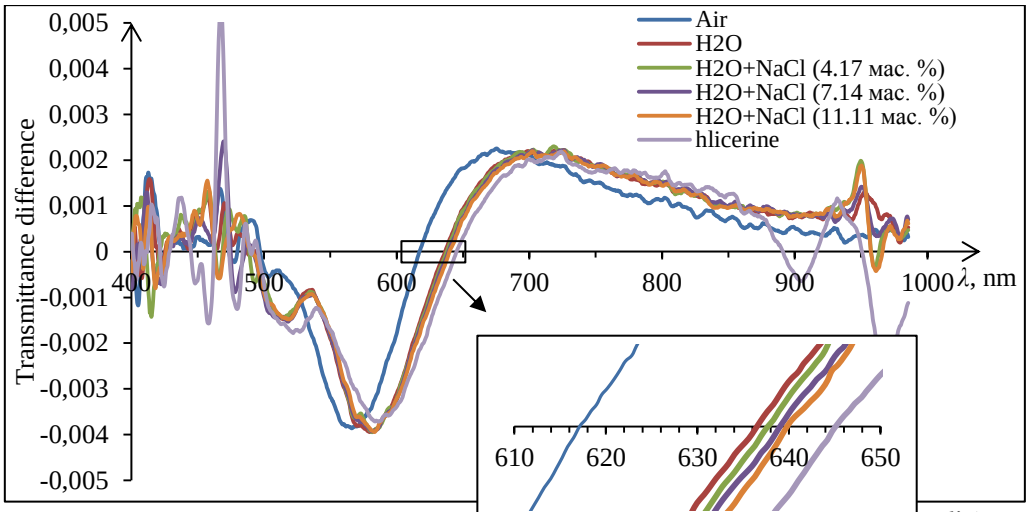



*рис.2. Спектральная зависимость первой производной от коэффициента пропускания dT/dλ для спектров, представленных на рис.1. На вставке показан увеличенный масштаб участка в области локализованного плазмон-поляритонного резонанса.*

Таким образом экспериментально показана возможность построения сенсора для детектирования изменения свойств диэлектрических прозрачных сред на бале систем плазмонных самоорганизующихся наночастиц путём детектирования изменения спектрального положения локализованного плазмон-поляритонного резонанса.

Работа выполнена в рамках поддержанного ФГАОУ ВО «Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского» гранта № ВГ22/2018.

Список публикаций:

*[1] Tomilin S.V., Yanovsky A.S., J. of Nano- and Electronic Physics., 5 (2013) 03014*

# Формирование силикатных биопокрытий на поверхности сплава Mg0.8Ca

***Угодчикова Анна Владимировна***
*Национальный исследовательский Томский политехнический университет*
*Седельникова Мария Борисовна, д.т.н.*
Ugodch99@gmail.ru

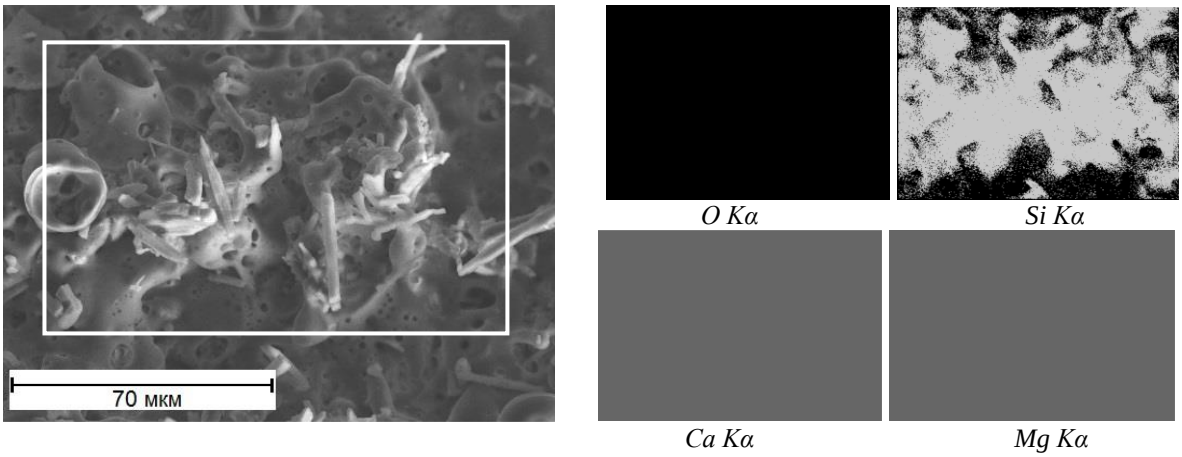
На сегодняшний день перспективными материалами для имплантатов в ортопедии и дентальной хирургии являются композиты, включающие металлическую подложку и биоактивное покрытие, способное ускорять процессы формирования костной ткани на поверхности изделия [1]. Как правило, в качестве основы для биоактивных покрытий используют фосфаты кальция – гидроксиапатит, трикальцийфосфат и др. Однако, в литературных источниках есть сведения о том, что биокерамика на основе силикатов кальция и магния стимулирует регенерацию костной ткани на границе раздела ткань-имплантат без промежуточного фиброзного слоя [2]. Магний и его сплавы обладают особыми свойствами, позволяющими, применять их в регенеративной медицине. Они являются биосовместимыми и, что более интересно, способны резорбироваться в жидкостях организма. Однако, процессы биодеградации магния в среде организма происходят быстрее, чем восстановление костной ткани [3]. Силикатные покрытия, в этом случае, с одной стороны могут выполнять защитную функцию, снижая скорость коррозии магниевого сплава, и с другой стороны, ускорять процессы остеоинтеграции. Среди существующих методов формирования покрытий метод микродугового оксидирования (МДО) является наиболее перспективным, поскольку позволяет получать биосовместимые пористые покрытия толщиной до сотен микрометров на имплантатах сложной формы.

Целью представленной работы являлось получение силикатных биопокрытий методом МДО на поверхности биорезорбируемого магниевого сплава, исследование влияния напряжения процесса на формирование покрытий, их морфологию поверхности и элементный состав.

Для проведения экспериментов были подготовлены образцы – металлические пластинки (10×10×1 мм) из магниевого сплава Mg0.8Ca. Нанесение покрытий осуществлялось на установке «MicroArc 3.0 System» (ИФПМ СО РАН) с использованием силикат-содержащего электролита-суспензии. Основные параметры процесса МДО варьировали в следующих пределах: напряжение 350 – 500 В, время нанесения покрытия 5 мин. Исследования морфологии поверхности и элементного состава проводили методом растровой электронной микроскопии (РЭМ) (SEM 515 Philips, ТРЦКП ТГУ, г. Томск).

При варьировании напряжения процесса МДО от 350 до 500 В толщина и масса силикатных биопокрытий увеличиваются от 40 мкм до 150 мкм, и от 6 до 20 мг, соответственно.

Анализ РЭМ – изображений показал, что покрытия имеют развитую морфологию поверхности. На поверхности покрытий установлено присутствие большого количества разнонаправленных кристаллов *(рис.1а)*, игольчатой формы, характерной для волластонита ($CaSiO_3$). С ростом напряжения процесса до 500 В количество кристаллов заметно увеличивается. Кроме того, в покрытиях присутствуют поры со средним размером 5 мкм, равномерно распределенные по всей поверхности.




*а)* *б)*

*рис.1 РЭМ-изображение силикатного биопокрытия, полученного при напряжении процесса 350 В (а), карты распределения элементов (б)*

В результате анализа элементного состава покрытий выявлено повышенное содержание в них кремния и кальция *(рис.1б)*. Причем карты распределения элементов показывают, что кремний и кальций, в основном, сосредоточены в игольчатых кристаллах, что подтверждает присутствие волластонита в покрытиях.

Исследование изменения элементного состава биопокрытий в зависимости от напряжения процесса МДО показало, что с ростом напряжения в диапазоне 350–500 В концентрация кальция увеличивается от 9,5 до 14 ат. %, а магния уменьшается от 6,5 до 3 ат. %. При этом, содержание кремния остается неизменным, равным 17 ат.%.

Таким образом, методом МДО, при варьировании напряжения процесса от 350 В до 500 В получены силикатные биопокрытия с толщиной и массой до 150 мкм и 20 мгм, соответственно. Повышение напряжения способствует увеличению концентрации кальция и снижению магния в покрытии, что говорит об участии магния в формировании соединений в покрытиях. В результате анализа РЭМ-изображений и элементного состава биопокрытий выявлено присутствие в них волластонита. Известно, что волластонит способствует активизации процессов биоминерализации и образования костной ткани на границе кость-имплант [4].

Работа выполнена в Институте физики прочности и материаловедения СО РАН, при финансовой поддержке программы фундаментальных исследований СО РАН, 2013–2020 гг., проект № III.23.2.5.

Список публикаций:

*[1] A. Mahapatro /Bio-functional nano-coatings on metallic biomaterials.Materials Science and Engineering. (2015).№ C55.C. 227.*
*[2] M.A. Sainz, P. Pena, S. Serena, A. Caballero // Influence of design on bioactivity of novel CaSiO3–CaMg(SiO3)2 bioceramics: In vitro simulated body fluid test and thermodynamic simulation. Acta Biomaterialia. (2010). №.6. C. 2797.*
*[3] M.P. Staiger, A.M. Pietak, J. Huadmai, G. Dias // Magnesium and its alloys as orthopedic biomaterials: A review. Biomaterials. (2006). № 9. C.1728.*
*[4] M. Dziadek, E. Stodolak-Zych, K. Cholewa-Kowalska, Biodegradable ceramic-polymer composites for biomedical applications: A review // Materials Science and Engineering. (2017). №C 71. C. 1175.*

## Исследование СВЧ свойств композитов на основе углеродных нанотрубок

***Федосов Эрнест Энверович***
***Томилин Сергей Владимирович***
*Крымский федеральный университет им. В.И. Вернадского*
*Бержанский Владимир Наумович*
ernestfedosov@gmail.com

**Введение.** Углеродные нанотрубки (УНТ) представляют собой протяженные цилиндрические структуры, состоящие из одной или нескольких свернутых в трубку графеновых плоскостей, открытые на концах либо заканчивающиеся полусферической границей, которая может рассматриваться как половина молекулы фуллерена [1]. Изучение физико-химических свойств УНТ представляют интерес как для фундаментальной, так и для прикладной науки [2], например, при разработке новых радиопоглощающих материалов.

В связи с этим, актуальным является исследование диэлектрических и магнитных свойств композитов на основе углеродных нанотрубок в СВЧ диапазоне. Предварительно были проведены исследования степени однородности УНТ на лазерном анализаторе размеров частиц HORIBA LA-960 и их магнитной восприимчивости.

Для измерения основных электродинамических характеристик (комплексные диэлектрической и магнитной проницаемостей) использовался резонансный метод измерения СВЧ-параметров в диапазоне от 9 до 10 ГГц, реализованный на базе панорамного измерителя КСВН Р2-65[3].

Образцы представляли из себя сферы диаметром 4 мм. В качестве матрицы использовался силикон. Наполнение матрицы углеродными нанотрубками осуществлялось

посредством смешивания материала матрицы в вязком состоянии с диспергированным раствором углеродных нанотрубок. Диспергирование УНТ осуществлялось в ультразвуковой ванне в течении 10 минут. Были изготовлены 8 образцов с массовым содержанием УНТ от 0 до 10%.

На рис. 1а,в представлены зависимости действительной и мнимой частей диэлектрической проницаемости композитов от частоты, а на рис. 1б,г частотные зависимости действительной и мнимой части магнитной проницаемости. Видно, что наибольшим поглощением в широком диапазоне частот обладает композит содержащий 10 мас.% УНТ.

Следует отметить, что мнимая часть магнитной проницаемости композитов на основе УНТ достаточно низкая. Увеличение мнимой части магнитной проницаемости композитов на основе УНТ, необходимой для создания радиопоглощающих материалов, может быть достигнуто путем добавления мелкодисперсного порошка феррита.

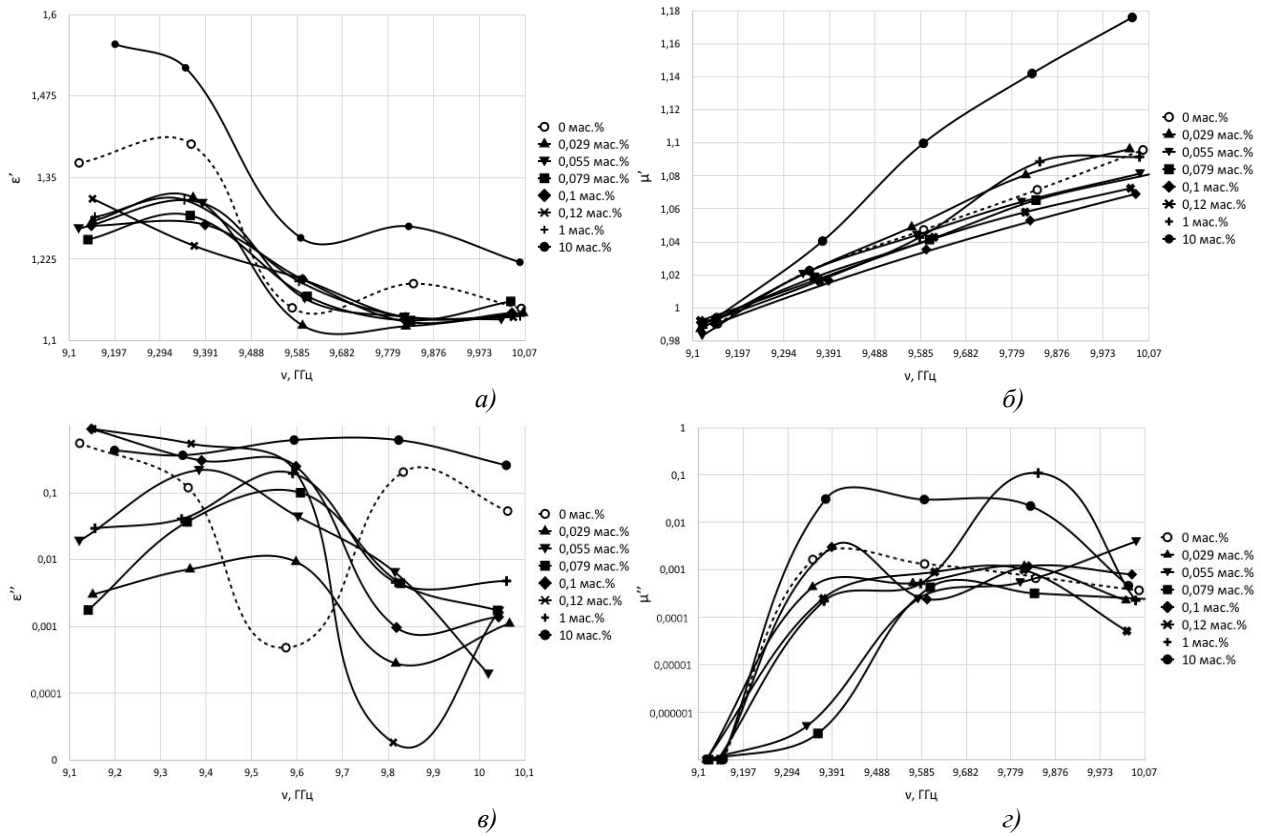



*рис.1 СВЧ спектры диэлектрической (а,в) и магнитной (б,г) проницаемостей композита на основе УНТ*

Работа выполнена в рамках поддержанного ФГАОУ ВО «Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского» гранта № ВГ22/2018.

Список публикаций:

*[1] Мищенко С.В., Ткачев А.Г. Углеродные наноматериалы. Производство, свойства, применение. - М.: Машиностроение, 2008. - 320 с.*

*[2] Многослойные углеродные нанотрубки и их применение / М.М. Томишко, О.В. Демичева, А.М. Алексеев и др. // Рос. хим. журн. (Журн. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева). – 2008. – Т. LII, № 5. – С. 39–43.*

*[3] Пономаренко В.И., Васильев Ю.И., Журавлев С.И. Резонаторный метод измерения СВЧ-параметров сферических образцов. // Электромеханические методы измерения контроля. Вып.3, с.110, Томск, 1985.*

## Расчет диэлектрических свойств и эффективных масс тяжелых электронов и дырок для азидов двухвалентных металлов

***Филиппов Даниил Игоревич***

***Гордиенко Алексей Болеславович***

*Кемеровский государственный университет*

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

*filippovdaniil@kemsu.ru*

Неорганические азиды металлов представляют класс хорошо изученных соединений, которые, благодаря своей высокой чувствительности к внешним воздействиям, широко применяются на практике в качестве энергетических материалов (инициирующие взрывчатые вещества, ракетное топливо, пиротехнические изделия) [1, 2]. С другой стороны, взрывоопасность и высокая чувствительность данных соединений к внешним воздействиям может серьезно затруднять их экспериментальное исследование. В частности, в литературе отсутствуют данные по эффективным массам электронов и дырок для азидов двухвалентных металлов. Важность данных величин для описания явлений переноса [3], а также сложности, возникающие при использовании стандартных численных методов расчета эффективных масс [4], определяют актуальность исследований, направленных на разработку аналитических методов их расчета. Еще одной важной задачей, решение которой открывает возможность теоретического описания диэлектрических свойств кристаллов,

является вычисление отклика многоэлектронной системы на внешнее однородное электрическое поле. Обе эти задачи можно решить в рамках единой расчетной схемы [5, 4], адаптированной для периодических систем и позволяющей вычислять аналитические производные одноэлектронных энергий по компонентам волнового вектора и напряженности электрического поля. Все это определяет цель настоящей работы – вычисление диэлектрических свойств и эффективных масс электронов и дырок для группы азидов двухвалентных металлов с использованием базиса псевдоатомных орбиталей.

Выражение для вторых аналитических производных от одноэлектронных энергий по компонентам волнового вектора $E_{n\mathbf{k}}^{k_\alpha,k_\beta}$ в рамках используемой схемы записывается как

$$E_{n\mathbf{k}}^{k_\alpha,k_\beta}=\left[\tilde{H}_{nn}^{k_\beta,k_\alpha}-E_{n\mathbf{k}}\tilde{S}_{nn}^{k_\beta,k_\alpha}\right]-E_{n\mathbf{k}}^{k_\beta}\tilde{S}_{nn}^{k_\alpha}-E_{n\mathbf{k}}^{k_\alpha}\tilde{S}_{nn}^{k_\beta}+2\Re\sum_{l\neq n}\frac{\left[\tilde{H}_{nl}^{k_\alpha}-E_{n\mathbf{k}}\tilde{S}_{nl}^{k_\alpha}\right]\left[\tilde{H}_{ln}^{k_\beta}-E_{n\mathbf{k}}\tilde{S}_{ln}^{k_\beta}\right]}{E_{n\mathbf{k}}-E_{l\mathbf{k}}}, \qquad (1)$$

где введены следующие обозначения ($H_{ij\mathbf{k}}$ и $S_{ij\mathbf{k}}$ – матрицы гамильтониана и перекрывания, $C_{in}(\mathbf{k})$ – коэффициенты разложения одночастичных волновых функций по базису псевдоатомных орбиталей):

$$\tilde{H}_{nm}^{k_\beta,k_\alpha}=\sum_{i,j}C_{in}^{*}(\mathbf{k})H_{ij\mathbf{k}}^{k_\beta,k_\alpha}C_{jm}(\mathbf{k}), \qquad \tilde{S}_{nm}^{k_\beta,k_\alpha}=\sum_{i,j}C_{in}^{*}(\mathbf{k})S_{ij\mathbf{k}}^{k_\beta,k_\alpha}C_{jm}(\mathbf{k}). \qquad (2)$$

В качестве объектов исследования были выбраны кристаллы α-$Pb(N_3)_2$, α-$Hg(N_3)_2$, $Cd(N_3)_2$ и $Ba(N_3)_2$. Все расчеты проводились в приближении LDA [6] (а также с применением GGA-mBJ потенциала [7] для оценки ширины запрещенной зоны, см. рис.1, (б)) с использованием DZ-базиса PAO [8] и **k**-сетки 4×4×4. Азид свинца, как видно из рис. 1, обладает сложной структурой; в его элементарной ячейке расположены 12 формульных единиц (84 атома). В валентной области его зонного спектра содержится 204 зоны, обладающие низкой дисперсией (что указывает на большие значения эффективных масс дырок) и разделенные на 5 групп.

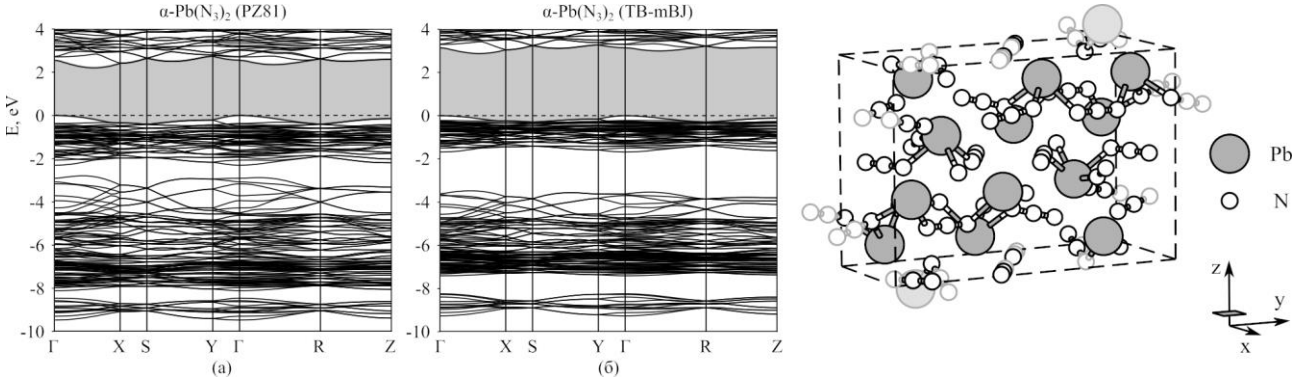



*рис.1. Фрагменты зонной структуры, увеличенные вблизи потолка валентной области спектра ((а) –LDA приближение, (б) – meta-GGA) и элементарная ячейка кристалла α-$Pb(N_3)_2$.*

В силу отсутствия в литературе расчетных данных по эффективным массам для азида свинца, для проверки достоверности полученных результатов также были проведены расчеты в программе Abinit с использованием базиса плоских волн PW [9]. В таблице ниже приведены полученные значения эффективных масс тяжелых электронов и дырок, вычисленных с применением выражения (1), а также значения тензора высокочастотной диэлектрической проницаемости, в сравнении для двух различных расчетных схем и экспериментальными значениями из работы [10].

| Расчет | Электроны | | | Дырки | | | Диэлектрическая проницаемость | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | $m_{100}^{*}/m_0$ | $m_{010}^{*}/m_0$ | $m_{001}^{*}/m_0$ | $m_{100}^{*}/m_0$ | $m_{010}^{*}/m_0$ | $m_{001}^{*}/m_0$ | $\varepsilon_{xx}^{\infty}$ | $\varepsilon_{yy}^{\infty}$ | $\varepsilon_{zz}^{\infty}$ |
| PAO | 0.570 | 0.388 | 1.075 | 1.763 | 0.484 | 1.522 | 5.13 | 6.29 | 3.41 |
| PW | 0.610 | 0.417 | 1.276 | 1.857 | 0.473 | 1.463 | 5.02 | 6.41 | 3.62 |
| [10] | – | – | – | – | – | – | 5.0 | 7.0 | 3.5 |

Видно, что абсолютные значения эффективных масс и их анизотропия находятся в хорошем согласии для двух различных расчетных схем, а вычисленные значения диэлектрической проницаемости хорошо согласуются с соответствующими экспериментальными величинами.

Таким образом, в настоящей работе для группы азидов двухвалентных металлов впервые были получены оценки значений эффективных масс тяжелых электронов и дырок, а также вычислены диэлектрические свойства данных соединений, включающие в себя значения высокочастотной диэлектрической проницаемости.

Список публикаций:
*[1] Fair H.D., Walker R.F. // Energetic Materials: Technology of the Inorganic Azides. 1977. V. 2. 296 p.*
*[2] Haase J. Large-scale Preparation and Usage of Azides // Organic Azides: Syntheses and Applications. 2009. P. 29–51.*
*[3] Yu P.Y., Cardona M. // Fundamentals of Semiconductors. 2010. 775 p.*
*[4] Гордиенко А.Б., Филиппов Д.И. // Физика твердого тела. 2018. V. 60, № 5. P. 857.*
*[5] Pople J. A., Krishnan R., Schlegel H. B. and Binkley J. S. // Int. J. Quantum Chem. 1979. V. 16. P. 225–241.*
*[6] Perdew J. P., Zunger A. // Phys. Rev. B. 1981. V. 23. P. 5048.*
*[7] Tran F., Blaha P. // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 102. P. 226401.*
*[8] Jansen R. W., Sankey O. F. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. P. 6520–6531.*
*[9] Gonze X. et al. Comput. Mater. Sci. 2002. V. 25, № 3. P. 478–492.*
*[10] Garrett W. L, Kemmey, P. J. // Dielectric Constant Measurements on Lead Azide Single Crystals. 1980. 14 p.*

## Двухрезонансный плазмон-поляритонный сенсор

***Хацаюк Вероника Викторовна***
***Бержанский Владимир Наумович, Томилин Сергей Владимирович***
*Крымский федеральный университет, Физико-технический институт*
*veronika74069@yandex.ru*

Принцип действия датчиков на поверхностных плазмон-поляритонах (ППП) основан на физическом эффекте изменения резонансной частоты ППП волн в зависимости от диэлектрической проницаемости диэлектрика, граничащего с чувствительным металлическим (плазмонным) слоем.

Существует две классические схемы возбуждения поверхностных плазмонов, в которых используется призма полного внутреннего отражения (ПВО) – схемы Кретчмана и Отто [1]. Данные схемы позволяют получить возбуждение ППП оптическим способом. Разница этих двух схем заключается в наличии или отсутствии диэлектрической прослойки между призмой и металлической пленкой.

В данной работе была разработана структура, позволяющая совместить схемы Кретчмана и Отто в одном устройстве (*рис.1*). В данной структуре используется призма с высоким показателем преломления (например, из гадолиний-галлиевого граната GGG, $n$ = 1.960 для $\lambda$ = 632,8 нм), на которую напыляется слой диэлектрика толщиной 100 – 300 нм с показателем преломления меньше, чем у призмы, но больше, чем у окружающей среды (например, кварц $SiO_2$, $n$ = 1,456 для $\lambda$ = 632,8 нм). Поверх диэлектрического слоя наносится плазмонная металлическая плёнка толщиной 30 – 70 нм. Таким образом, при малых углах падения луча эффект полного внутреннего отражения (ПВО) возникает на границе диэлектрического слоя и окружающей среды, при этом возбуждается плазмон-поляритонная волна на внешней поверхности плазмонной плёнки по схеме Кретчмана. При больших углах падения луча эффект ПВО наблюдается на границе призмы и диэлектрического слоя, при этом возбуждается плазмон-поляритонная волна на внутренней поверхности плазмонной плёнки по схеме Отто. При этом условие резонанса по Кретчману и соответствующий резонансный угол будут существенно зависеть от диэлектрических свойств окружающей среды, что позволяет реализовать сенсорную систему для детектирования изменения свойств этой среды. Резонанс по Отто, напротив, зависит в основном от свойств диэлектрического слоя и, соответственно, изменяться будет слабо. Такой резонансный пик можно использовать как опорный при сравнении с изменением положения пика по Кретчману, что существенно повышает точность и стабильность работы двухрезонансной схемы по сравнению с однорезонансной в режиме сенсора.

Для синтезирования двухрезонансного плазмон-поляритонного датчика применялись методы вакуумного напыления. Напыление буферного слоя $SiO_2$ на гипотенузную грань призмы из монокристаллического GGG осуществлялось методом ионно-реактивного распыления кварцевой мишени в среде аргона. При напылении применялась методика формирования покрытия с градиентом эффективной толщины $h_{eff}$ [2].

Напыление плазмонного слоя Au выполнялось методом термического испарения в вакууме исходной загрузки с чистотой Au не хуже 99,95% из молибден-вольфрамового тигля. Остаточное давление в рабочей камере не превышало $6 \cdot 10^{-4}$ Па. Толщина слоя Au составляла 35 нм.

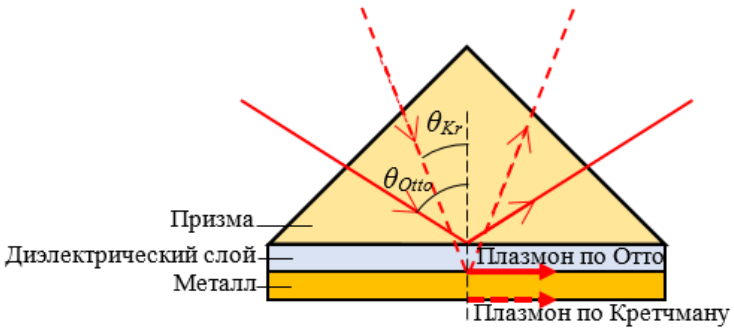



*рис.1. Двухрезонансная схема возбуждения поверхностных плазмон-поляритоннных волн*

Исследование резонансных свойств двухрезонансного датчика осуществлялось с использованием оптической системы на базе эллипсометра ЛЭФ-3М-1. Исследования проводились в различных участках градиента эффективной толщины $h_{eff}$ буферного слоя $SiO_2$.

Видно, что при малой толщине буферного слоя ($h_{eff}$ = 20 нм, *рис. 2а*.), на рефлектометрической кривой наблюдается только один пик резонанса по Кретчману. Увеличение толщины буферного слоя до 70 нм (*рис. 2б*) приводит к возникновению локального минимума, соответствующего поглощению энергии на возбуждение плазмонных волн по схеме Отто. Однако. резонанс имеет крайне низкую добротность и малую глубину резонансного пика. Увеличение толщины $h_{eff}$ буферного слоя $SiO_2$ до 127 нм (*рис. 2в*) приводит к увеличению глубины и добротности резонанса по схеме Отто.

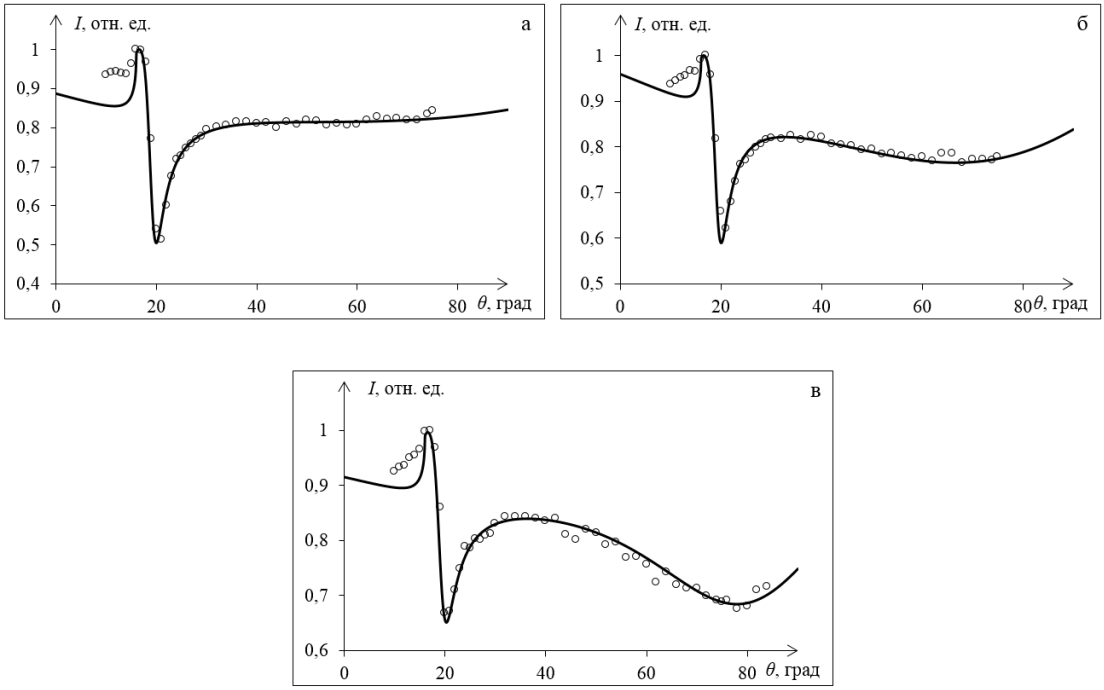



*рис.2. Резонансные свойства синтезированного двухрезонансного датчика в различных участках градиента $h_{eff}$ буферного слоя $SiO_2$: а – 20 нм, б – 70 нм, в – 127 нм (круги – экспериментальные точки, сплошная линия – моделирование в пакете WinSpall).*

Проведенные экспериментальные исследования подтвердили работоспособность предложенной схемы двухрезонансного плазмон-поляритонного датчика.

Работа выполнена в рамках поддержанного ФГАОУ ВО «Крымский федеральный университет имени В.И. Вернадского» гранта № ВГ22/2018.

Список публикаций:

*[1] Tomilin S.V., Berzhansky V.N., Shaposhnikov A.N., Prokopov A.R., Milyukova E.T., Karavaynikov A.V., Tomilina O.A. // Journal of Physics: Conference Series. 2016. N. 741. P. 012113.*

*[2] Tomilin S V, Yanovsky A S. J. of Nano- and Electronic Physics. 2013. Vol. 5(3). P. 03014.*

# Мессбауэровское исследование магнитных свойств твердого раствора $BiFe_{1-x}Cr_xO_3$

***Шихова Евгения Петровна*** [1]

***Шляхова Софья Алексеевна[1], Раевский Игорь Павлович[1], Пушкарев Анатолий Васильевич[2], Олехнович Николай Михайлович[2], Радюш Юрий Владимирович[2], Раевская Светлана Игоревна[1], Малитская Мария Алексеевна[1]***

*[1]Физический факультет Южного федерального университета*

*[2]НИИ физики Южного федерального университета*

*[3]НПЦ НАН Белоруссии по материаловедению*

*Кубрин Станислав Петрович[1], к.ф.-м.н.*

zhes1999@yandex.ru

В настоящее время одной из задач физики конденсированных сред и физического материаловедения, является получение однофазного мультиферроика. Мультиферроики обладают одновременно спонтанной намагниченностью, спонтанной поляризацией и пьезоэлектрическим эффектом. Одним из способов получения однофазных мультиферроиков является получение новых соединений на основе твердых растворов $BiFeO_3$. Катионные замещения позволяют изменять температуры магнитного и сегнетоэлектрического упорядочений, а также разрушить пространственную спин-модулированную структуру (ПСМС). Разрушение ПСМС приводит к возникновению слабого ферромагнетизма и усилению магнитоэлектрического взаимодействия. Данная работа посвящена исследованию влияния катионных замещений на магнитные свойства $BiFe_{1-x}Cr_xO_3$ (x=0.1-0.85).

При комнатной температуре спектры образцов $BiFe_{1-x}Cr_xO_3$ (x=0.1-0.4) состоят из зеемановских секстетов, соответствующих ионам $Fe^{3+}$. Спектр образца с x=0.1 состоит из двух секстетов, с параметрами примерно равными параметрам секстетов спектра чистого $BiFeO_3$. Наличие двух секстетов обусловлено наличием ПСМС. Спектры с x=0.2-0.4 являются суперпозицией трех секстетов. Каждый из секстетов соответствует ионам $Fe^{3+}$ с различным числом ионов $Cr^{3+}$ в качестве ближайшего соседа. Изменение структуры мессбауэровских спектров для образцов с x>0.1 указывает на разрушение ПСМС. Мессбауэровские спектры образцов с x≥0.5 представляют собой парамагнитный дублет. Наличие дублета обусловлено композиционным разупорядочением катионов B-подрешетки.

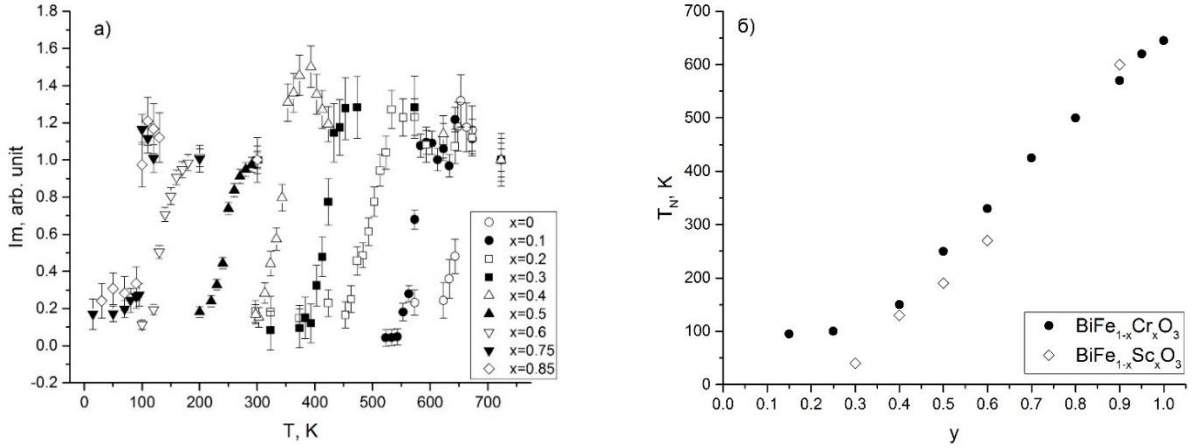



*рис.1. а) Температурные зависимости интенсивности парамагнитных линий мессбауэровских спектров образцов твердого раствора $BiFe_{1-x}Cr_xO_3$ приведенных к их значениям при максимальной температуре. б) Концентрационные зависимости $T_N$ для образцов твердых растворов $BiFe_{1-x}Cr_xO_3$ и $BiFe_{1-x}Sc_xO_3$*

Для оценки температур магнитных фазовых переходов в образцах $BiFe_{1-x}Cr_xO_3$ использовался метод температурного сканирования. На рис.1а приведены температурные зависимости интенсивности парамагнитных линий мессбауэроских спектров. Спад на зависимостях примерно соответствует температуре магнитного фазового перехода. На рис. 2б приведена концентрационная зависимость $T_N$ для образцов твердого раствора $BiFe_{1-x}Cr_xO_3$, для сравнения также приведен график для системы $BiFe_{1-x}Sc_xO_3$. Оба графика, линейно убывают с ростом концентрации замещающих катионов. Зависимость $T_N(y)$ для $BiFe_{1-x}Cr_xO_3$ линейно убывает в диапазоне $0.4 \le y \le 1$, так же, как и при замене Fe на немагнитный Sc. Это обусловлено слабым взаимодействием между ионами хрома и железа. При y<0.4 значения $T_N$ изменяются слабо, что вероятно связано с изменением типа магнитного порядка с антиферромагнитного на спин-стекольное. При этом $T_N(y)$ для системs $BiFe_{1-x}Sc_xO_3$ принимает более низкие значения. Вероятно, в системе $BiFe_{1-x}Cr_xO_3$ при y<0.4 в магнитное взаимодействие помимо ионов $Fe^{3+}$, значительный вклад вносят ионы Cr.

Работы выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 16-52-0072 Бел а).

# Влияние катионных замещений на магнитные свойства твердого раствора (1-x)$BiFeO_3$-x$PbFe_{0.5}Sb_{0.5}O_3$ исследованное методами мессбауэровской спектроскопии

***Шляхова Софья Алексеевна*[1]**

***Шихова Евгения Петровна*[1], , *Раевский Игорь Павлович*[1], *Пушкарев Анатолий Васильевич*[3], *Олехнович Николай Михайлович*[3], *Радюш Юрий Владимирович*[3], *Раевская Светлана Игоревна*[1], *Малитская Мария Алексеевна*[1]**

*[1]Южный федеральный университет [2]Научно-исследовательский институт физики ЮФУ*

*[3]Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению*

*Кубрин Станислав Петрович[1], к.ф.-м.н.*

sofia.shlyahova@gmail.com

Мультиферроики – материалы, обладающие двумя типами упорядочений: ферромагнитным и сегнетоэлектрическим, являются одним из перспективных материалов для современной микроэлектроники [1]. Возможность управления их электрическими свойствами с помощью магнитного воздействия и наоборот, открывает широкие перспективы для создания на их основе устройств хранения информации со сверхвысокой плотностью записи [2]. Одним из многообещающих кандидатов на роль такого однофазного соединения является феррит висмута $BiFeO_3$ [1]. $BiFeO_3$ служит основой для создания тонкопленочных материалов, керамик и твердых растворов. Особенностью феррита висмута является реализуемая в нем пространственная спин-модулированная структура (ПСМС). Однако для возникновения МЭ эффекта и спонтанной намагниченности требуется разрушение ПСМС [1].

В работе представлены результаты исследования влияния катионных замещений и композиционного упорядочения на магнитные свойства в твердом растворе (1-x)$BiFeO_3$-x$PbFe_{0.5}Sb_{0.5}O_3$ (x=0.05, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9) методами мессбауэровской спектроскопии.

При комнатной температуре структура мессбауэровских спектров образцов с x=0.05 и 0.1 совпадает со структурой спектра $BiFeO_3$ и состоит из двух зеемановских секстетов. Мессбауэровские спектры образцов с x=0.3 и 0.5 представляют собой зеемановский секстет, соответствующий ионам $Fe^{3+}$ в октаэдрическом окружении. Изменение структуры мессбауэровского спектра при x>0.1 обусловлено разрушением ПСМС. На мессбауэровских спектрах с x=0.7 и 0.9 наблюдаются две парамагнитные компоненты – дублет и синглет. Синглетная компонента соответствует ионам $Fe^{3+}$ в областях с композиционным упорядочением, а дублет – $Fe^{3+}$ в разупорядоченных областях.

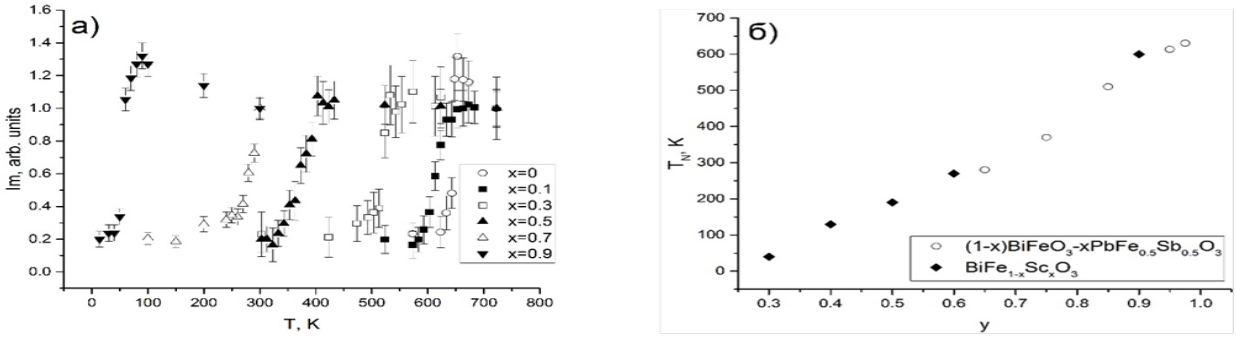



*рис.1. а) Температурные зависимости интенсивности парамагнитных линий мессбауэровских спектров образцов твердого раствора (1-x)$BiFeO_3$- x$PbFe_{1/2}Sb_{1/2}O_3$ (x=0.05, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9) приведенных к их значениям при максимальной температуре. б) Концентрационные зависимости $T_N$ для образцов твердых растворов (1-x)$BiFeO_3$- x$PbFe_{0.5}Sb_{0.5}O_3$ и $BiFe_{1-x}Sc_xO_3$*

Для определения температур магнитных фазовых переходов ($T_N$), были проведены измерения методом температурного сканирования. На рис. 1а представлены температурные зависимости интенсивности парамагнитных линий мессбауэровских спектров. Спад на зависимостях примерно соответствует температуре магнитного фазового перехода. На рис. 1б приведена концентрационная зависимость $T_N$ для образцов твердого раствора (1-x)$BiFeO_3$- x$PbFe_{0.5}Sb_{0.5}O_3$, для сравнения также приведен график для системы $BiFe_{1-x}Sc_xO_3$. Оба графика, линейно убывают с ростом концентрации замещающих катионов. В перовскитных соединениях $T_N$ в основном определяется числом цепочек $Fe^{3+}$–$O^{2-}$–$Fe^{3+}$[3], через которые происходит косвенное обменное взаимодействие. Понижение $T_N$ обусловлено понижением числа цепочек $Fe^{3+}$–$O^{2-}$–$Fe^{3+}$ в результате катионных замещений. Кроме того, число цепочек $Fe^{3+}$–$O^{2-}$–$Fe^{3+}$ зависит от степени композиционного упорядочения. Таким образом, более быстрое понижение $T_N$ с ростом концентрации замещающих катионов обусловлено частичным упорядочением ионов $Fe^{3+}$ и $Sb^{5+}$.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований(грант№16-52-0072Бел а)

Список публикаций:

*[1] W. Eerenstein, N. D. Mathur, J. F. Scott // Nature. 2006. V. 442. p. 759.*

*[2] J.F. Scott//Nature Materials.2007. V. 6. P.256.*

*[3] Goodenough J.B. Magnetism and chemical bond. N-Y. – London: Interscience Publisher, 1963*