

# **ЭЛЕКТРОННЫЕ, СПИНОВЫЕ И КВАНТОВЫЕ ПРОЦЕССЫ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ**

**1994**



**2024**

**Сборник тезисов докладов и сообщений**

***Всероссийской конференции  
с международным участием***

— посвященной 300-летию основания  
Российской Академии наук и 30-летию образования  
Института физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН

Уфа - 2024

Отделение физических наук Российской академии наук  
Уфимский федеральный исследовательский центр РАН  
Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН  
Институт математики с вычислительным центром УФИЦ РАН  
Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы

**Всероссийская конференция  
с международным участием**

**ЭЛЕКТРОННЫЕ, СПИНОВЫЕ И  
КВАНТОВЫЕ ПРОЦЕССЫ В  
МОЛЕКУЛЯРНЫХ И КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ  
СИСТЕМАХ**



Сборник тезисов докладов и сообщений  
21–24 мая 2024 года

Уфа–2024

УДК 53  
ББК 22.3

**Электронные, спиновые и квантовые процессы в молекулярных и кристаллических системах:** Сб. тезисов докладов и сообщений на Всерос. конф. – Уфа: Изд-во БГПУ, 2024. – 111 с.

ISBN .....

Сборник подготовлен по материалам, предоставленным участниками Всероссийской конференции с международным участием "Электронные, спиновые и квантовые процессы в молекулярных и кристаллических системах", приуроченной к 300-летию основания Российской Академии наук и 30-летию образования Института физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, проводимой с 21 по 24 мая 2024 года на базе ИФМК УФИЦ РАН, г. Уфа. Конференция охватывает широкий спектр актуальных фундаментальных и прикладных проблем, связанных с электронными, спиновыми и квантовыми процессами, происходящих в молекулярных структурах, органических, магнитных, наноструктурных материалах и жидких кристаллах.

Издание предназначено для научных сотрудников, аспирантов и студентов физических и физико-химических специальностей.

*Материалы сборника напечатаны с представленных авторами оригиналов на основании решения рецензионной комиссии.*

**Рецензионная комиссия:** Академик РАН Салихов К.М., д.ф.-м.н. Асфандиаров Н.Л., д.ф.-м.н. Гареева З.В., д.ф.-м.н. Гундеров Д.В., к.ф.-м.н. Зайцев Н.Л., д.ф.-м.н. Иванов А.И., к.ф.-м.н. Карамов Д.Д., к.ф.-м.н. Лебедев Ю.А., к.ф.-м.н. Овчинников М.Ю., д.ф.-м.н. Пятаков А.П.

**Редакционная коллегия:** Цеплин Е.Е., Таюпов М.М., Пшеничнюк С.А.

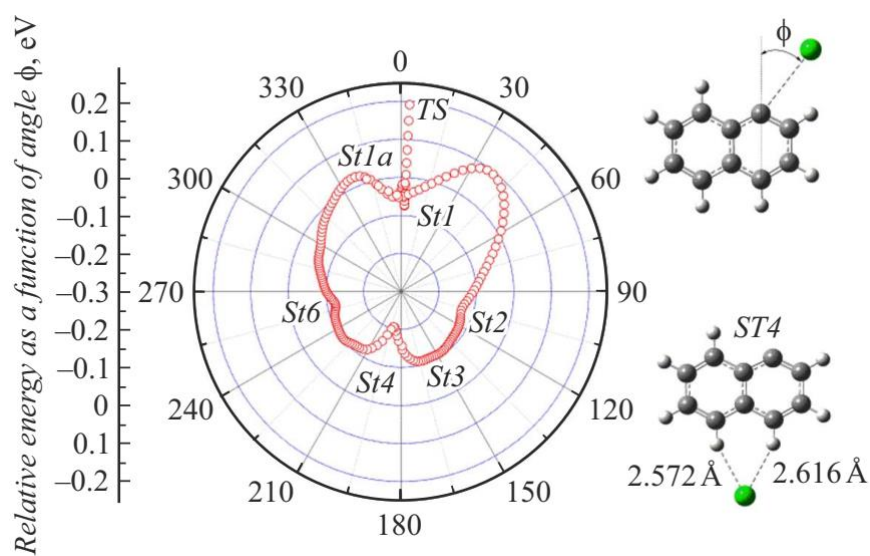
ISBN .....

© ИФМК УФИЦ РАН, 2024

## ОГЛАВЛЕНИЕ

1. Электрон-стимулированные процессы в молекулярных системах.....	5
2. Перспективные органические материалы, явления на поверхности, границах раздела и в тонких пленках .....	27
3. Магнетизм и спинтроника .....	54
4. Физика наноструктурных материалов .....	71
5. Физика жидких кристаллов .....	88
6. Математические и квантово-химические методы в физике .....	94
Авторский указатель.....	105

# Электрон-стимулированные процессы в молекулярных системах



## THEORY OF ELECTRON ATTACHMENT TO MOLECULES AND CLUSTERS

Fabrikant I.I.

*Department of Physics and Astronomy, University of Nebraska,  
Lincoln, NE 68588, USA, e-mail: ifabrikant@unl.edu*

Dissociative electron attachment (DEA) to polyatomic molecules is a complicated process involving couplings between electron and nuclear motion. Completely *ab initio* calculations are presently possible only for diatomics, and model approaches should be developed for more complex targets, particularly if nonlocal effects, leading to vibrational Feshbach resonances and threshold cusps, are important [1].

This talk will start with a review of an extension of the nonlocal theory to two and more degrees of freedom. The general theory will be applied to the  $\text{CF}_3\text{Cl}$  compound. In some cases, a simpler formulation is possible in terms of the effective range theory which was applied recently to description of cusp structure in DEA to  $\text{Fe}(\text{CO})_5$ , and to a series of 5-membered heterocyclic rings [2].

Cluster effects in DEA will be discussed next. An important example is the process of electron-induced bond breaking in DNA bases which can be strongly influenced by surrounding water molecules. We have found two effects in the N-H bond breaking in thymine due to electron impact, one leading to the enhancement of the DEA cross section due to the increased lifetime of the intermediate negative-ion state [3], and the other leading to the decrease of the yield of the anionic fragments due to the hydrogen bonding between the nucleobase and the solvent [4,5].

### References:

1. Fabrikant I.I., Eden S., Mason N.J., Fedor J. // *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* 2017, V. 66, P. 546.
2. Pshenichnyuk S., Fabrikant I.I., Modelli A., Ptasinska S.A., Komolov A.S. // *Phys. Rev. A*, 2019, V. 100, 012708.
3. Smyth M., Kohanoff J., Fabrikant I.I. // *J. Chem. Phys.* 2014, V. 140, 184313.
4. McAllister M., Kazemigazestane N., Henry L., Gu B., Fabrikant I., Tribello G.A., Kohanoff J. // *J. Phys. Chem. B*, 2019, V. 123, P. 1537.
5. Kocisek J., Pysanenko A., Farník M., Fedor J. // *J. Phys. Chem. Lett.* 2016, V. 7, P. 3401.

**OVERVIEW OF ELECTRON COLLISIONS STUDIES AT DEPARTMENT  
OF EXPERIMENTAL PHYSICS COMENIUS UNIVERSITY BRATISLAVA**

Matejčík Štefan

*Department of Experimental Physics, Comenius University Bratislava, Slovakia,  
e-mail: matejcik@fmph.uniba.sk*

The study of electron-molecule interactions holds significant importance across various scientific disciplines, including plasma physics, radiation chemistry, and astrophysics. For decades, the Department of Experimental Physics (DEP) at Comenius University in Bratislava, Slovakia, has been actively engaged in this area, employing a range of experimental techniques. The department has fostered a fruitful collaboration with colleagues from the Institute of Physics of Molecules and Crystals in Ufa.

The research conducted at DEP in the field of electron collisions with molecules encompasses two distinct crossed-beam experiments. Firstly, there are studies on Electron Attachment to molecules and molecular clusters, with detection of the ionic products using mass spectrometry. Secondly, there are investigations into Electron-Induced Fluorescence, focusing on electron-induced excitation and dissociation processes.

Within the field of swarm experiments, numerous experimental studies have been conducted. These include electron drift studies conducted in various gases and gas mixtures, yielding valuable insights into electron mobilities in gases. Additionally, electron attachment studies at atmospheric pressure have provided rate coefficients and explored electron transfer reactions between negative ions and molecules, employing the Ion Mobility Spectrometry technique. During the lecture, an overview of the experimental techniques and significant findings will be presented.

## **CHARACTERIZATION OF TEMPORARY ANION STATES WITH ELECTRON TRANSMISSION SPECTROSCOPY AND DISSOCIATIVE ELECTRON ATTACHMENT SPECTROSCOPY**

Modelli Alberto

*Bologna University, Italy, e-mail: alberto.modelli@gmail.com*

A complete picture of the electronic structure requires the knowledge of both the filled and the empty levels, equally important from the theoretical and the reactivity points of view. Nevertheless, the electron affinity data available in the literature are scarce with respect to the wealth of ionization energy data supplied by photoelectron spectroscopy. Electron Transmission Spectroscopy (ETS) and Dissociative Electron Attachment Spectroscopy (DEAS) are experimental techniques suitable for studying formation of gas-phase temporary anion states and their dissociative decay channels.

ETS, in the format devised by G. Schulz, takes advantage of the sharp variations in the electron-molecule scattering cross-section caused by resonance processes, namely, temporary capture of electrons with appropriate energy into empty MOs. The measured resonance energies are the vertical electron affinities with opposite sign. The major limit of ETS is that only negative electron affinities can be measured. DEAS measures the abundance of negative fragments produced by dissociation of anion states formed by resonance, as a function of the incident electron energy, in kinetic competition with simple re-emission of the extra electron. Anion energies and localization properties can be predicted with the aid of theoretical calculations, although description of spatially diffuse unstable anion states poses difficulties not encountered for neutral molecules or cation states.

A systematic ETS study of the effects produced by substituents bearing heteroatoms of groups 14-17 on the electron-acceptor properties of hydrocarbons showed that third-row (or heavier) elements cause a significant electron affinity increase, as well as the presence of low-energy  $\sigma^*$  anion states. Both these effects were mainly ascribed to the presence of low-energy empty *d* atomic orbitals.

Quantitative DEAS measurements in benzenoid chloro-derivatives revealed that the lowest  $\pi^*$  anion state, with mainly benzene character, can decay with production of chloride fragment anions, their yield being associated with the localization of the  $\pi^*$  anion on the chlorine atom, which in turn depends on the extent of  $\sigma^*/\pi^*$  mixing.

**GAS-PHASE RESONANCE ELECTRON CAPTURE BY SMALL MOLECULES, LIKE AZOBENZENES, FULLERENES AND OTHERS**

Vasil'ev Y.V.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> *Agilent Technologies, Inc., Santa Clara, California, USA,  
e-mail: yury.vasilev@agilent.com.*

<sup>b</sup> *Linus Pauling Institute, Oregon State University, Corvallis, Oregon, USA,  
e-mail: yury.vasilev@oregonstate.edu.*

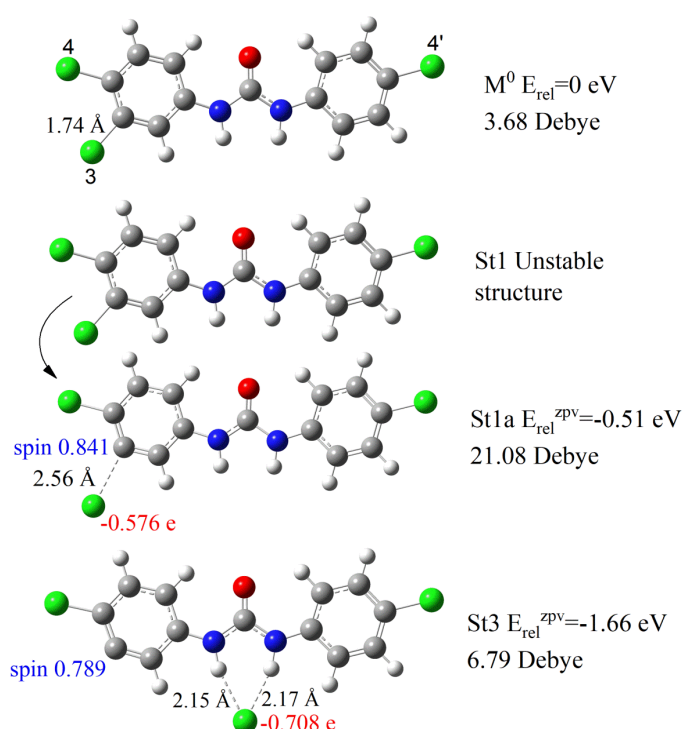
In the oral presentation, the author will discuss low-energy, resonant electron-molecule interaction resulting in the formation of molecular negative ions. These gas phase collisions are characterized by a total electron capture cross-section and dissociative electron capture cross section. Due to electron autodetachment from molecular negative ions, the total electron capture cross section is always larger than the dissociative electron capture, by both the magnitude and width on the energy scale. The author will consider which factors determine the electron autodetachment and show that independently of the initial resonance state, transition to the ground state is usually major and very often the only process for observed electron autodetachment from molecular negative ions, at least for compounds consisting of elements on the second period of the Mendeleev periodic table. The author will also discuss molecular negative ion experiments conducted on two types of mass spectrometers, namely, magnetic-sector and reflectron time-of flight instruments. Due to different experimental parameters and dimensions, the lifetime measured by these instruments might be different even if the measurements were conducted in similar experimental conditions. The author will consider which instrumental characteristics might have the major effect on negative ion lifetimes. The author will also show that statistical theories, like Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus (RRKM) theory, perfectly describe all known observation effects associated with electron autodetachment. Based on this fact, the author will advocate the idea that measurements of the negative ion lifetime can be used as a method for electron affinity determination.

## НЕКОВАЛЕНТНЫЕ СТРУКТУРЫ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ

Асфандиаров Н.Л., Муфтахов М.В., Рахмеев Р.Г., Пшеничнюк С.А.

*Институт физики молекул и кристаллов - обособленное структурное подразделение Уфимского федерального исследовательского центра РАН, Россия, Уфа, пр-кт Октября, 151, e-mail: nail@anrb.ru*

В докладе представлены результаты исследования методом спектроскопии диссоциативного захвата электронов молекулами триклокарбана ( $C_{13}H_9Cl_3N_2O$ ). Установлено, что долгоживущие молекулярные ионы ( $\tau_a=3000$  мкс) претерпевают существенное изменение геометрии, приводящее к резкому увеличению сродства к электрону. Процесс иллюстрируется на рис. 1. Представлены результаты ранее найденных примеров нековалентных структур отрицательных ионов.



**Рис. 1.** Трансформация геометрии молекулярного иона триклокарбана.

**ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ДИГАЛОИДОВ  
EuX<sub>2</sub> (X = Cl, Br). АЛЮМИНИЙАЛКИЛЫ КАК УСИЛИТЕЛИ  
ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ИОНА ДВУХВАЛЕНТНОГО ЕВРОПИЯ<sup>1</sup>**

Булгаков Р.Г.<sup>a</sup>, Галимов Д.И.<sup>b</sup>, Якупова С.М.<sup>b</sup>, Василюк К.С.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, 450054, Россия, Уфа, пр. Октября 71, e-mail: profbulgakov@yandex.ru*

<sup>b</sup> *Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, 450075, Россия, Уфа, пр. Октября 141, e-mail: eliseevasm@yandex.ru*

Дигалоиды европия EuX<sub>2</sub> (X = Cl, Br) – традиционные лантанидные прекурсоры при синтезе практически важных Eu<sup>2+</sup>-люминофоров. В работе получены новые данные о фотофизических свойствах растворов EuCl<sub>2</sub> и EuBr<sub>2</sub> в тетрагирофуране (ТГФ). Для этих дигалоидов впервые измерены спектры фотолюминесценции (ФЛ) и возбуждения ФЛ, а также квантовые выходы ФЛ и времена жизни возбужденных ионов Eu<sup>2+\*</sup>, свидетельствующие о том, что ФЛ обусловлена межконфигурационным переходом (5d<sup>1</sup>4f<sup>6</sup> → 4f<sup>7</sup>). Обнаружен эффект кардинального увеличения интенсивности ФЛ растворов EuCl<sub>2</sub> и EuBr<sub>2</sub> в ТГФ в присутствии алюминийалкилов (АА). При этом двухвалентное состояние европия сохраняется, о чем свидетельствуют диффузные спектры ФЛ системы [EuX<sub>2</sub>-ТНФ-АА], а также наносекундные времена жизни эмиттера этой ФЛ электронно-возбужденного иона Eu<sup>2+\*</sup>. Интенсивность ФЛ этой системы растет с увеличением концентрации АА. На основе полученных экспериментальных данных и литературных сведений о структуре катализаторов на основе систем [галогенид лантанида-АА] предполагается, что обнаруженный нами эффект увеличения интенсивности ФЛ связан с образованием четырехцентрового комплекса, в котором ион Eu<sup>2+</sup> связан с ионом алюминия Al<sup>3+</sup> через два трехатомных звена: Eu<sup>2+</sup>-R-Al<sup>3+</sup> и Eu<sup>2+</sup>-Cl-Al<sup>3+</sup>, образуя жесткую структуру. Эта жесткая структура уменьшает энергию колебаний связей Eu<sup>2+</sup> с соседними атомами лигандов, что снижает вероятность безызлучательной дезактивации иона Eu<sup>2+\*</sup> на колебательные моды лигандного окружения.

<sup>1</sup> Работа выполнена в рамках государственного задания ИМФК и ИНК УФИЦ РАН

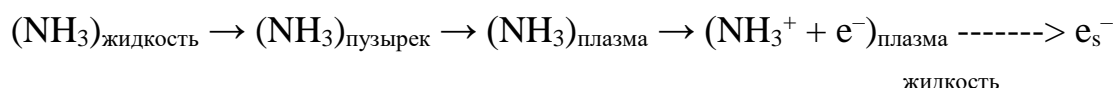
**СТИМУЛИРОВАННАЯ ЭЛЕКТРОНОМ  
СОНОХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ  $\text{Ce}^{3+}$  В ЖИДКОМ АММИАКЕ<sup>1</sup>**

Гареев Б.М., Абдрахманов А.М., Якшембетова Л.Р., Шарипов Г.Л.

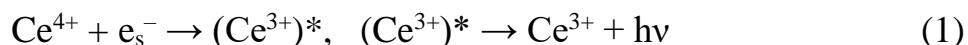
*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 141, e-mail: ink@anrb.ru*

Сонохемилюминесценция (СХЛ) представляет собой испускание света в хемилюминесцентных реакциях продуктов разложения (сонолиза) молекул жидкости в возникающих в ней под действием ультразвука и осциллирующих кавитационных пузырьках. Эти активные первичные продукты сонолиза, например, для воды Н и ОН, попадают из пузырьков в объём жидкости и взаимодействуют с растворенными веществами, генерируя электронновозбужденные продукты этих реакций, излучающие фотоны. Известно ограниченное число подобных реакций. В настоящей работе обнаружен новый пример СХЛ.

Найденная сонохемилюминесценция наблюдается при однопузырьковом сонолизе растворов  $\text{Ce}(\text{SO}_4)_2$  в жидком аммиаке при  $-75$  °С. Излучение света стимулируется образованием при сонолизе аммиака в пузырьковой плазме электронов, сольватируемых в жидком аммиаке:



Далее сольватированные электроны ( $e_s^-$ ) восстанавливают в растворе ионы  $\text{Ce}^{4+}$  до ионов  $\text{Ce}^{3+}$ , часть из которых образуется в электронно-возбужденном состоянии и испускают затем фотоны:



Излучение света ионами  $\text{Ce}^{3+}$  при сонолизе растворов  $\text{Ce}^{4+}$  в  $\text{NH}_3$  зарегистрировано в спектре свечения по характерной полосе с максимумом 405 нм, совпадающей с полосой фотолуминесценции данного иона. Эта полоса тушится при сонолизе в присутствии в растворе  $\text{AgNO}_3$ , так как ион  $\text{Ag}^+$  является акцептором  $e_s^-$  и ингибирует хемилюминесцентную реакцию (1).

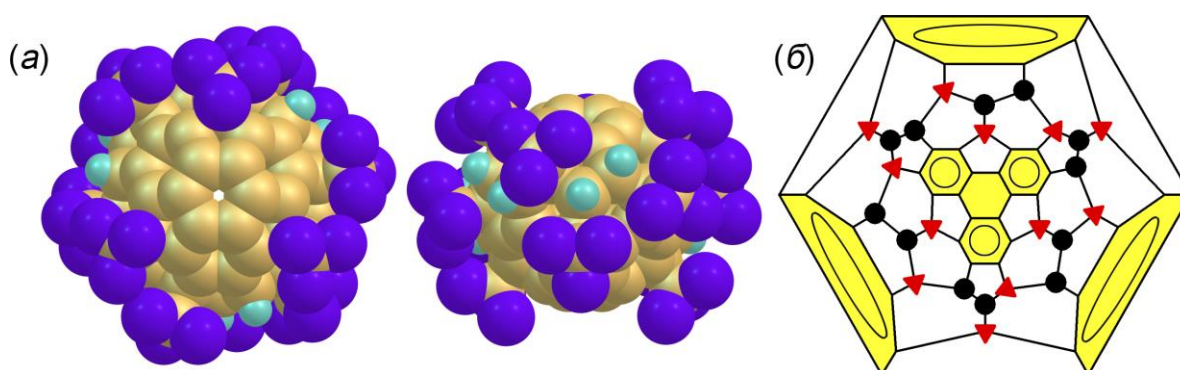
<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 23-23-00112

## АНИОНЫ ФТОРПРОИЗВОДНЫХ ФУЛЛЕРЕНОВ: СТРУКТУРНО-ПРЕДОПРЕДЕЛЕННАЯ ЛОКАЛИЗАЦИЯ ЗАРЯДОВОЙ/СПИНОВОЙ ПЛОТНОСТИ ДЛЯ НАПРАВЛЕННОГО СИНТЕЗА ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Горюнков А.А.

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
119991, Россия, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3,  
e-mail: aag@thermo.chem.msu.ru*

Высокая электронная акцепторность, способность к делокализации избыточной электронной плотности на углеродном каркасе, а также электронный тип проводимости делает фуллерены привлекательными для оптоэлектронных и электрокаталитических приложений. Присоединение функциональных групп к углеродному остову позволяет формировать  $\pi$ -сопряженные системы различного размера, строения и связности, и тем самым управлять энергией и локализацией граничных молекулярных орбиталей. Для анионных форм таких соединений достигается структурно-предопределенная локализация зарядовой и спиновой плотности на определенных атомах углерода, что позволяет ввести на эти атомы иные функциональные группы. Примеры таких превращений (Рис. 1), обнаруженные закономерности и перспективы применения получаемых бифункциональных материалов будут рассмотрены на примере трифторметил- и дифторметиленфуллеренов.



**Рис. 1.** (а) Две проекции и (б) диаграмма Шлегеля  $S_6-C_{60}(CF_3)H_{12}$  (красными треугольниками отмечены позиции групп  $CF_3$ , черными кругами – атомов водорода)

**КОРРЕЛЯЦИЯ МЕЖДУ ПЕРВЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ  
ВОССТАНОВЛЕНИЯ В МЕТОДЕ ЦВА И ЗНАЧЕНИЕМ СРОДСТВА  
К ЭЛЕКТРОНУ В МЕТОДЕ СДЗЭ**

Маркова А.В.<sup>a</sup>, Рыбальченко А.В.<sup>b</sup>,  
Асфандиаров Н.Л.<sup>a</sup>, Таюпов М.М.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: login.markova@yandex.ru*

<sup>b</sup>*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
119991, Россия, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 3*

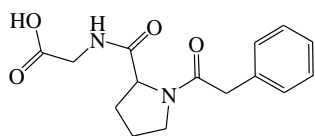
Метод циклической вольт-амперметрии (ЦВА) — мощный и популярный электрохимический метод, обычно используемый для исследования процессов восстановления и окисления молекул. Он позволяет найти значения  $E_{\text{ВЗМОЭХ}}$  и  $E_{\text{НВМОЭХ}}$ , следовательно, и ширину запрещенной зоны в исследуемых веществах. В ходе представленной работы были исследованы два хлорсодержащих вещества пентахлорфенол (ПХФ) и гексохлорбензол (ГХБ) методами ЦВА, спектроскопии диссоциативного захвата электронов (СДЗЭ) и теории функционала плотности (ТФП). Исследования методом СДЗЭ показали, что молекулы ГХБ образовывали долгоживущие отрицательные молекулярные ионы (ОМИ), поэтому удалось в рамках простой модели Аррениуса оценить сродство к электрону ( $E_{\text{A}_a}$ ) равное 1.87 эВ. ПХФ же не образовывал ОМИ, поэтому определить  $E_{\text{A}_a}$  методом СДЗЭ не представлялось возможным. В предположении, что между первым восстановительным потенциалом и значением  $E_{\text{A}_a}$  существует линейная корреляция, для растворов ПХФ и ГХБ в пропиленкарбонате были проведены исследования методом ЦВА. Они показали, что при применении такого рода оценок,  $E_{\text{A}_a}$  для ГХБ составляет  $2.1 \pm 0.10$  эВ, а для ПХФ  $1.25 \pm 0.10$  эВ. С учетом того, что квантово-химические расчеты немного завышают оценки  $E_{\text{A}_a}$ , данный результат хорошо коррелирует со значением, полученным для ПХФ методом ТФП САМ-В3LYP/6-311G+(d, p), составившим 1.39 эВ.

## РЕЗОНАНСНЫЙ ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОНОВ МОЛЕКУЛАМИ Z-GLY-PRO.

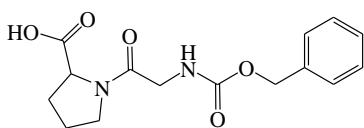
Муфтахов М.В., Щукин П.В., Туктаров Р.Ф.

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: conf-imcr@anrb.ru

Методом масс-спектрометрии резонансного захвата электронов исследованы процессы образования отрицательных ионов (ОИ) из N-бензилоксикарбонил-глицил-L-пролина (Z-Gly-Pro), по своему строению похожего на N-бензилоксикарбонил-L-пролилглицин (Рис.1), этиловый эфир которого является ноотропным препаратом Ноопепт [1]. Выяснилось, что процессы в ОИ Z-Gly-Pro в основном сходны с таковыми в других, ранее изученных олигопептидах. Отличительной особенностью процессов в Z-Gly-Pro является выделение сверхинтенсивного иона с карбоксильной структурой депротонированного глицилпролина. Он образуется последовательной фрагментацией молекулярного иона, инициируемой выбросом бензильного радикала и Н-сдвигом в промежуточном ионе и его декарбоксилированием. Анализ электронно-индуцированных



N-фенилацетил-L-пролилглицин



N-бензилоксикарбонил-глицил-L-пролин

реакций в пептидах в вакууме выявил некоторые аналогии с реакциями метаболизма препарата Ноопепт в живых организмах, в частности, приводящих к образованию нейропептида цикло-L-пролилглицина [2]. Обнаруженные особенности процессов образования ОИ в Z-Gly-Pro позволяют предполагать, что его производные будут проявлять повышенную нейрорепродуктивную активность или

**Рис. 1.** Структуры модифицированных пептидов

будут обладать новыми свойствами по сравнению с Ноопептом.

### Список литературы:

1. Островская Р.У., Гудашева Т.А., Воронина Т.А., Середенин С.Б. Оригинальный ноотропный и нейропротективный препарат ноопепт // Экспериментальная и клиническая фармакология, 2002, Т. 62, № 5, С. 66-72.
2. Gudasheva T.A., Boyko S.S., Akparov V.Kh., Ostrovskaya R.U., Skoldinov A.P., Rozantsev G.G., Voronina T.A., Zherdev V.P., Seredenin S.B. Identification of a novel endogenous memory facilitating cyclic dipeptide cyclo-prolylglycine in rat brain // FEBS Letters, 1996, V. 391, P. 149-152.

## ЭЛЕКТРОН-СТИМУЛИРОВАННАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ МОЛЕКУЛ ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИХ АРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ УЛЬТРАЗВУКА НА СОДЕРЖАЩИЕ ИХ СУСПЕНЗИИ<sup>1</sup>

Панова Н.А., Тухбатуллин А.А., Шарипов Г.Л.

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 14, e-mail: adiska0501@gmail.com*

В представленной работе рассматривается сонотриболлюминесценция (СТЛ, свечение, возникающее во время столкновений микрокристаллов в жидкости при ультразвуковом воздействии на дисперсные системы [1]) суспензий, содержащих полициклические ароматические углеводороды (ПАУ). Ультразвуковое воздействие (22 кГц) проводили в кювете диспергатора с погружным титановым волноводом с плоским торцом. Суспензии получали путем добавления кристаллов сульфата тербия(III) или европия(III) в декан, в котором также растворяли ПАУ (дифенил, нафталин, антрацен, фенантрен, тетрацен, пирен, трифенилен и коронен). В спектрах СТЛ этих дисперсных систем обнаружены интенсивные полосы свечения молекул ПАУ, совпадающие со спектрами фотолюминесценции аналогичных гомогенных растворов ПАУ. Наличие данных углеводородов в суспензиях не влияет на свечение иона  $\text{Ln}^{3+}$ , также регистрируемое в спектрах СТЛ. Предложен механизм возбуждения молекул ПАУ во время СТЛ суспензий. При ультразвуковой обработке происходит ускорение кристаллов в суспензиях с последующими их столкновениями и разрушением, сопровождаемым электризацией и генерацией заряженных частиц (электронов). Генерированные электроны, попадая в жидкость возбуждают при столкновениях молекулы ПАУ (аналогично с процессом радиоллюминесценции).

### Список литературы:

1. Tukhbatullin A.A., Sharipov G.L., Burangulova N.F., Mustafin A.G. Luminescence of aromatic hydrocarbon molecules in the sonication of terbium sulfate suspensions // Ultrasonics Sonochemistry, 2019, V. 50, P. 251-254.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 23-12-20002

**ФОТОИНДУЦИРОВАННЫЙ ПЕРЕНОС ЭЛЕКТРОНА  
В БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ – ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ  
ХИМИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ ЯДЕР**

Поляков Н.Э.

*Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского СО РАН,  
630090, Новосибирск, ул. Институтская 3, e-mail: polyakov@kinetics.nsc.ru*

Химические реакции, включающие стадию переноса электрона, играют огромную роль в живых системах, например, в фотосинтезе или в процессе дыхания. Для понимания механизма и контроля скорости этих процессов необходимо изучение структуры и свойств, образующихся короткоживущих радикальных интермедиатов реакций. Особый интерес представляют радикальные интермедиаты лекарственных соединений и их биологических мишеней, в частности аминокислотных остатков, расположенных в сайтах связывания ферментов и клеточных рецепторов. В нашей лаборатории для исследования структуры и реакционной способности таких радикальных интермедиатов разработан оригинальный подход, основанный на использовании фотогенерации радикальных частиц и их регистрации методом химической поляризации ядер (ХПЯ). Метод ХПЯ основан на детектировании неравновесной ядерной заселенности в спектрах ЯМР, возникающей при протекании радикальной реакции в высоких магнитных полях.

Данный подход был успешно применен к исследованию ряда практически важных биологических процессов и явлений, в частности, фотоиндуцированное повреждение клеточных мембран с участием фоточувствительных лекарственных соединений, взаимодействие лекарственных молекул с активными сайтами клеточных рецепторов, стереоселективность терапевтической активности хиральных лекарств, и ряда других [1].

**Список литературы:**

1. Ageeva A.A., et.al. Optical configuration effect on the structure and reactivity of diastereomers revealed by spin effects and molecular dynamics calculations // Int. J. Mol. Sci., 2022, V. 23, P. 38.

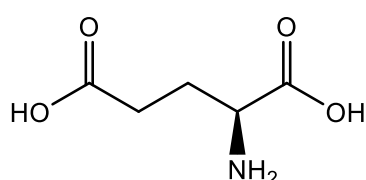
## ОСОБЕННОСТИ ДИССОЦИАТИВНОГО ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ ЭНАНТИОМЕРАМИ ГЛУТАМИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Пшеничнюк С.А.<sup>a</sup>, Асфандиаров Н.Л.<sup>a</sup>, Рахмеев Р.Г.<sup>a</sup>, Терещенко О.Е.<sup>b</sup>

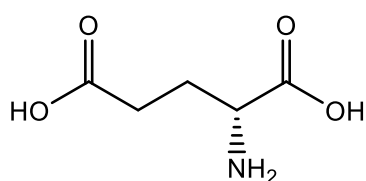
<sup>a</sup>Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: sapsh@anrb.ru.

<sup>b</sup>Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, 630090,  
Россия, Новосибирск, Проспект ак. Лаврентьева, 13, e-mail: teresh@isp.nsc.ru.

Методом спектроскопии диссоциативного захвата электронов (ДЗЭ) [1] исследована фрагментация L- и D-изомеров глутаминовой кислоты (рис.1) при захвате медленных (0-15 эВ) электронов. Методы теории функционала плотности использованы для установления структуры фрагментов, энергетики диссоциации и предсказания положений резонансов



L-Glutamic acid



D-Glutamic acid

**Рис. 1.** Молекулярные структуры энантиомеров глутаминовой кислоты.

и предсказания положений резонансов формы. На основе представленных результатов обсуждаются особенности ДЗЭ исследованными молекулами, в том числе, связанные с наличием центра хиральности. Продемонстрирована (очевидная) необходимость использования спин-поляризованного пучка электронов для выявления зеркальной асимметрии динамического поведения отрицательных ионов соединений, проявляющих оптическую активность, как показано ранее на примере галогенпроизводных камфоры в контексте

проверки гипотезы Вестера-Ульбрихта [2,3].

### Список литературы:

1. Хвостенко В.И. Масс-спектрометрия отрицательных ионов в органической химии // М.: Наука, 1987.
2. Dreiling, J.M., Gay, T.J. Chirally sensitive electron-induced molecular breakup and the Vester-Ulbricht hypothesis // Phys. Rev. Lett., 2014, 113(11), 118103.
3. Dreiling, J.M., Lewis, F.W., Gay, T.J. Spin-polarized electron transmission through chiral halocamphor molecules // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 2018, 51(21), 21LT01.

## ДИССОЦИАТИВНЫЙ ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОНОВ ПРОИЗВОДНЫМИ 9,10-АНТРАХИНОНА В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

Рахмеев Р.Г.<sup>a</sup>, Асфандиаров Н.Л.<sup>a</sup>, Муфтахов М.В.<sup>a</sup>, Воробьев А.С.<sup>b</sup>,  
Пшеничнюк С.А.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: nail@anrb.ru

<sup>b</sup> Московский физико-технический институт  
(Национальный исследовательский университет), Москва, Россия

В работе методом спектроскопии диссоциативного захвата электронов (ДЗЭ) исследован ряд замещенных производных 9,10-антрахинона. Экспериментальные данные были измерены с помощью масс-спектрометра МИ-1201, переоборудованного для регистрации отрицательных ионов. На основании полученных кривых эффективного выхода ОИ при ДЗЭ оценены времена жизни молекулярных ОИ, исходя из которых в рамках простого приближения Аррениуса (1) оценены величины сродства к электрону  $EA_a^{LT}$

$$EA_a = \frac{\ln(\tau_a/\tau_0) \cdot (Nk_B T + \epsilon)}{N - \ln(\tau_a/\tau_0)} \quad (1)$$

Методом САМ-В3LYP/6-311+G(d,p) рассчитаны энергии сродства к электрону  $EA_a^{DFT}$ .

Сравнение полученных методом САМ-В3LYP/6-311+G(d,p) величин сродства к электрону  $EA_a^{DFT}$  с оценками из времен жизни молекулярных ОИ  $EA_a^{LT}$  при масштабировании вида:

$$EA_a^{LT} = 0,61468 \times EA_a^{DFT} + 0,411 \quad (2)$$

приводит к их корреляции с коэффициентом  $R^2 = 0,9999$ . Таким образом, предполагается, что применение простого приближения Аррениуса (1) для определения величины сродства к электрону вполне оправдано и может служить количественной оценкой  $EA_a$  снизу.

**О ТОНКОМ БАЛАНСЕ МЕЖДУ ОБРАЗОВАНИЕМ И РАСПАДОМ  
МОЛЕКУЛЯРНОГО АНИОНА ТЕТРАЦИАНОЭТИЛЕНА,  
ВЫЗВАННОМ РЕЗОНАНСНЫМ ПРИСОЕДИНЕНИЕМ ЭЛЕКТРОНОВ**

Сафронов А.М., Пшеничнюк С.А., Асфандиаров Н.Л., Таюпов М.М.

*Институт физики молекул и кристаллов - обособленное структурное  
подразделение Уфимского федерального исследовательского центра РАН,  
Россия, Уфа, пр-кт Октября, 151, safronov@anrb.ru*

В докладе представлены результаты исследования методом спектроскопии диссоциативного захвата электронов молекулами тетрацианоэтилена (TCNE). Установлено, что несмотря на относительно малый размер молекулы, долгоживущие молекулярные анионы TCNE<sup>-</sup> образуются не только при тепловой энергии электрона по механизму колебательного резонанса Фешбаха, но и через формообразующие резонансы при занятии падающим электроном молекулярных орбиталей  $\pi_4^*$  и  $\pi_5^*$ . Диссоциативные распады TCNE<sup>-</sup> наблюдаются в основном при энергии падающего электрона выше временного анионного состояния  $\pi_7^*$ , предсказанного при 1,69 эВ с помощью расчетов B3LYP/6-31G(d) в сочетании с эмпирической процедурой масштабирования. Присоединение электрона к орбитали  $\pi_6^*$  (предсказанной при 0,85 эВ) приводит к образованию долгоживущих видов TCNE<sup>-</sup>, которые могут распадаться через два конкурирующих процесса: отрыв дополнительного электрона, возникающий за сотни микросекунд, или выбросом двух цианогрупп с образованием отрицательного фрагмента [TCNE - 2(CN)]<sup>-</sup> на временном масштабе в десятки микросекунд.

**КОМПЛЕКСНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ ГАЗОВОЙ  
ХРОМАТО-МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ И  
СПЕКТРОСКОПИИ ДИССОЦИАТИВНОГО ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ  
ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИЗОМЕРНОГО СОСТАВА ОБРАЗЦОВ**

Таюпов М.М.<sup>a</sup>, Абдуллин М.Ф.<sup>b</sup>, Маркова А.В.<sup>a</sup>, Сафронов А.М.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> ИФМК УФИЦ РАН, Россия 450075, Уфа, Проспект Октября, 151,  
e-mail: [tayupovmansaf@yandex.ru](mailto:tayupovmansaf@yandex.ru)

<sup>b</sup> УфИХ УФИЦ РАН, 450054, Уфа, пр. Октября, 71

Индивидуальная для каждого вещества дискретность энергетических областей выхода отрицательных ионов, подчинение фрагментации отрицательных ионов строгим правилам отбора, избирательность по отношению к определенным каналам диссоциативного распада предоставляют уникальную возможность, с помощью метода спектроскопии диссоциативного захвата электронов (СДЗЭ), различать изомеры, выявлять положение заместителей и кратных связей, секвенировать пептиды и проводить анализ смесей веществ без их предварительного разделения [1].

В представленной работе, показано, что метод СДЗЭ и квантово-химические расчеты можно использовать в комплексе с газовой хромато-масс-спектрометрией для более точного определения типа изомеров в исследуемых образцах. Это достигается за счет того, что различные изомеры, в большинстве своем, будут иметь резонансы при разных энергиях налетающих электронов.

**Список литературы:**

1. Таюпов, М.М. и др. Определение примесных мод в спектрах диссоциативного захвата электронов молекулами бензофуран-3(2H)-она и бензофуран-2(3H)-она // Математическая физика и компьютерное моделирование, 2022, Т. 25, № 2, С. 49-59.

## ПОВЕРХНОСТНЫЕ И ОБЪЕМНЫЕ ИОНЫ В КАМЕРЕ ИОНИЗАЦИИ ИСТОЧНИКА ИОНОВ МАСС-СПЕКТРОМЕТРА

Туймедов Г.М., Лукин В.Г., Хвостенко О.Г.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: gmtknn@gmail.com*

Методом масс-спектрометрии отрицательных ионов исследовано резонансное взаимодействие ионизирующих электронов с молекулами, образующими долгоживущие газофазные автоионизационные отрицательные молекулярные ионы ( $^aM^-$ ). Ранее было показано [1], что часть ионов  $^aM^-$  адсорбируется на поверхности камеры ионизации (КИ) масс-спектрометра, после чего ионы либо нейтрализуются на ней, либо, превратившись в ионы  $^\infty M^-$  с «бесконечно большим» временем жизни ( $\tau_a = \infty$ ), десорбируются обратно в вакуум. Там они присоединяются к потоку «объемных» ионов  $^aM^-$ , направляющихся к системе регистрации, внося тем самым погрешность в измерение  $\tau_a(^aM^-)$ .

За счет энергетического фильтра, сконструированного на месте расщепленного электрода ионного источника [2], было проведено разделение ионов  $^\infty M^-$  и  $^aM^-$ , что позволило скорректировать ошибку в измерении  $\tau_a(^aM^-)$ . Действие фильтра обусловлено блокированием ионов  $^\infty M^-$  за счет их малой кинетической энергии ( $kT$ ). Действие фильтра проявляется в уменьшении ионного тока в системе регистрации при его подключении.

Применение энергетического фильтра позволило также изучить поверхностные явления с участием фрагментарных отрицательных ионов (ФОИ), которые могут достигать поверхности КИ в силу своего изначального «бесконечно большого» времени жизни. Показано, что адсорбция ФОИ способна вносить погрешность в относительные интенсивности пиков масс-спектра.

### Список литературы:

1. Лукин В.Г., Хвостенко О.Г. Влияние поверхностной адсорбции отрицательных ионов в ионном источнике на результаты измерений их времени жизни // УФН, 2017, Т. 198, № 9, С. 981-1002.
2. Лукин В.Г., Туймедов Г.М. Источник ионов с выталкивающим электродом U-образной формы // ПТЭ, 2013, № 5, С. 77-80.

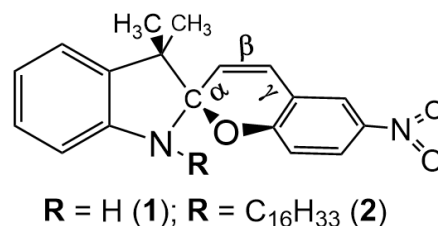
## РЕЗОНАНСНЫЙ ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОНОВ СПИРОПИРАНАМИ<sup>1</sup>

Хатымов Р.В.<sup>a</sup>, Муфтахов М.В.<sup>b</sup>, Митянов В.С.<sup>a</sup>, Райтман О.А.<sup>a</sup>, Терентьев А.Г.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, 125047 г. Москва, Миусская площадь, д. 9, стр. 1; e-mail: khatymov.r.v@mustr.ru

<sup>b</sup>Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа, пр. Октября 151

В настоящей работе масс-спектрометрическим методом изучены процессы, происходящие с молекулами спиропиранов (1) и (2) при резонансном захвате низкоэнергетических электронов (РЗЭ). Установлено, что в нескольких областях энергии электронов ( $E_e$ ) в диапазоне  $\sim 0$ –11 эВ образуются отрицательные ионы (ОИ), среди которых максимально интенсивный выход демонстрируют молекулярные ( $M^-$ ) и фрагментные ОИ  $[M-CH_3]^-$ . Для (1) также обнаружено интенсивное образование ОИ  $[M-OH]^-$ , что, вероятно, обусловлено доступным Н-сдвигом атома  $R = H$  к ближайшему атому О. Долгоживущие  $M^-$  с временами жизни  $\tau_a(M^-)$ , достигающими нескольких сотен мс, наблюдаются при  $E_e$  от  $\sim 0$  эВ до аномально высоких  $\approx 1$  эВ для (1) и  $\approx 4$  эВ для (2), указывая на большое адиабатическое электронное сродство ( $EA_a$ ) этих молекул. Оценка  $EA_a$  по  $\tau_a(M^-)$  с помощью статистической модели РРКМ [1] для (1) показала величину 1.23 эВ, что подтвердилось квантово-химическими расчетами  $PBE/3\zeta$ , выполненными для циклических форм  $M$  и  $M^-$  ( $EA_a^{расч} = 1.15$  эВ). При этом расчеты для всех 8 возможных конформаций мероцианина предсказали  $EA_a^{расч}$  не менее 2 эВ. Тем не менее, структурные преобразования, подобные фототрансформации нейтральных молекул в мероцианиновые формы, для ОИ спиропиранов при РЗЭ, судя по анализу диссоциативных процессов в  $M^-$  с помощью упомянутой модели РРКМ, происходят.



### Список литературы:

1. Khatymov R.V., Shchukin P.V., Muftakhov M.V., Yakushchenko I.K., Yarmolenko O.V., Pankratyev E. Yu. // Physical Chemistry Chemical Physics, 2020, V. 22, P. 3073-3088.

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России (проект FSSM-2023-0003, соглашение о предоставлении гранта № 075-03-2024-160).

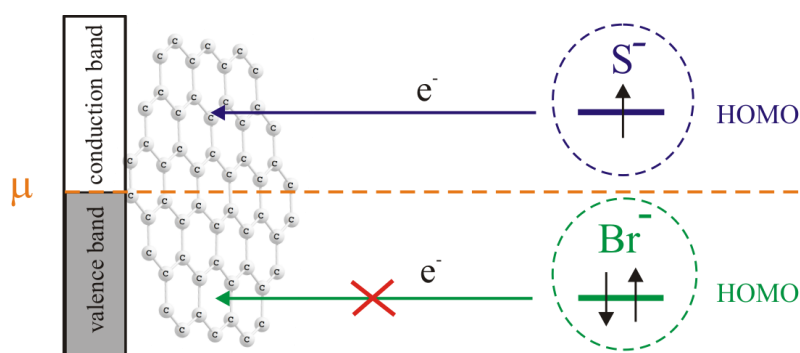
## ЭВОЛЮЦИЯ ГАЗОФАЗНЫХ ГИПЕРТЕРМИЧЕСКИХ ФРАГМЕНТАРНЫХ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ 1Н-1,2,4-ТРИАЗОЛА ПРИ ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С ГРАФИТОПОДОБНОЙ ПРОВОДЯЩЕЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

Цеплин Е.Е., Цеплина С.Н., Лукин В.Г., Хвостенко О.Г.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН*

*г. Уфа, пр. Октября, 151, e-mail: tzeplin@mail.ru*

Экспериментально обнаружено, что при взаимодействии гипертермических анионов  $\text{Br}^-$ ,  $\text{S}^-$  и  $\text{SH}^-$  с очищенной поверхностью сажи интенсивность кривых эффективного выхода фрагментарных анионов  $\text{S}^-$  и  $\text{SH}^-$  снижается, а  $\text{Br}^-$  – нет. На основе расчетов методом DFT B3LYP/6-311+G(d, p) и использования модели индуцированного заряда показано, что ВЗМО анионов  $\text{S}^-$  и  $\text{SH}^-$  при их адсорбции на поверхности находится в области энергий зоны проводимости графита, что позволяет дополнительному электрону туннелировать от этих анионов на поверхность и приводит к их нейтрализации. ВЗМО аниона  $\text{Br}^-$ , при его адсорбции на поверхности, расположена в области энергий валентной зоны



**Рис. 1.** Схема орбитальной модели взаимодействия анионов с графитоподобной поверхностью [1].

эволюция фрагментарных анионов 1Н-1,2,4-триазола при их взаимодействии с графитоподобной проводящей поверхностью.

### Список литературы:

1. Tseplin E.E., Tseplina S.N., Lukin V.G., Khvostenko O.G. Resonant charge transfer in the interaction of hyperthermal anions with a technical graphite-like conducting surface // Chem. Phys. Lett. 2022, V. 797, 139583.

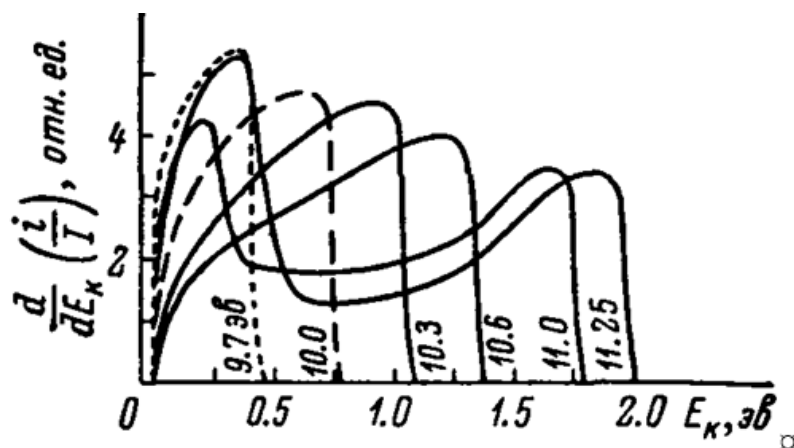
графита, где все уровни заняты электронами, поэтому это препятствует туннелированию электрона с аниона на поверхность, в результате чего нейтрализации аниона  $\text{Br}^-$  не наблюдается [1]. В текущей работе исследована

## РАЗВИТИЕ УЛЬТРАФИОЛЕТОВОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФОТОЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ В ЛГУ

Чижов Ю.В.

Санкт-Петербургский государственный университет, 199034, Россия,  
Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7-9, e-mail: spbu@spbu.ru

Доклад посвящен истории создания и развития метода УФ молекулярной фотоэлектронной спектроскопии в СССР и в РФ начиная с 1960 г. и до сегодняшних дней. Общеизвестно, что метод УФ ФЭС был впервые создан в ЛГУ советскими учеными А.Н. Терениным, Ф.И. Вилесовым и Б.Л. Курбатовым, а результаты впервые были представлены в 1961 в публикации «Распределение электронов по энергиям при фотоионизации ароматических аминов в газовой фазе» в докладах АН СССР, Т. 138, С. 1329.



**Рис. 1.** Распределение электронов по кинетическим энергиям при фотоионизации бензола. Кривые приведены к одной интенсивности света.

В докладе рассматриваются условия и обстоятельства возникновения метода именно в ЛГУ. Сообщается о намерениях Шведской Академии наук номинировать эту работу на Нобелевскую премию. Приводятся избранные примеры интересных результатов. Рассмотрено влияние прогресса квантово-химических методов и доступности соответствующих программных пакетов на совершенствование исследований методом УФ молекулярной фотоэлектронной спектроскопии.

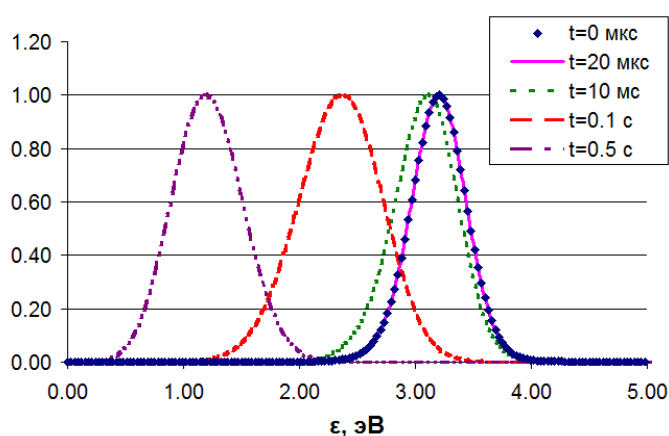
## ВЛИЯЕТ ЛИ РАДИАЦИОННОЕ ОХЛАЖДЕНИЕ НА ВРЕМЯ ЖИЗНИ ИЗОЛИРОВАННЫХ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ?

Щукин П.В.<sup>a</sup>, Хатымов Р.В.<sup>b</sup>, Муфтахов М.В.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, г. Уфа, пр. Октября, д. 151, e-mail: pavel@anrb.ru.

<sup>b</sup>Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

В настоящей работе с помощью простой гармонической каскадной модели [1] на примере долгоживущих молекулярных отрицательных ионов (ОИ) феназина были рассчитаны константы скорости радиационного охлаждения и оценены потери внутренней энергии ОИ. На рис. 1 точками показана кривая исходной функции распределения молекулярных ОИ феназина по внутренней энергии  $\epsilon$ , рассчитанная для энергии электронов  $E_e = 1.5$  эВ и оцененного значения электронного сродства  $E_{A_a} = 1.51$  эВ. На этом же рисунке различными линиями построены графики функции распределения, полученные с учетом вклада рассчитанных констант скоростей радиационного охлаждения для разных



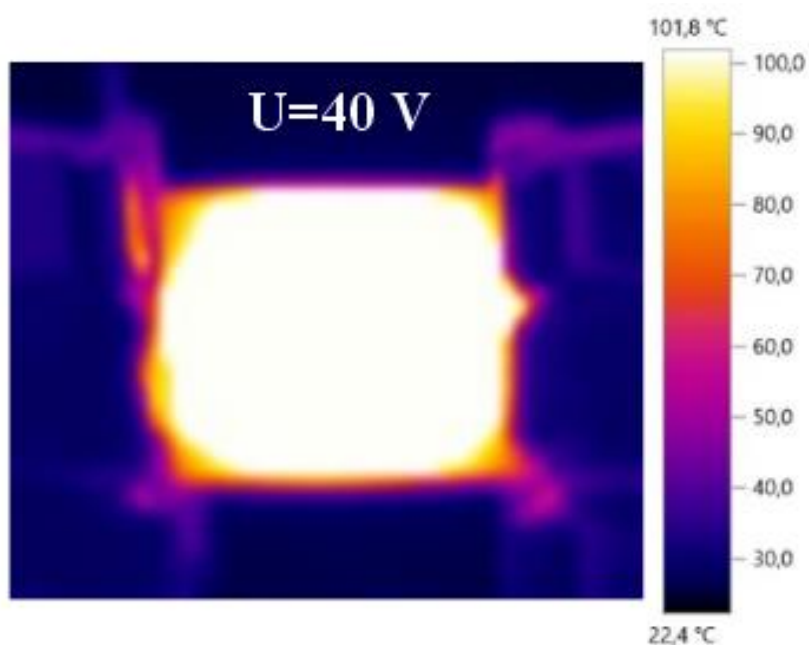
**Рис. 1.** Распределение молекулярных отрицательных ионов феназина по внутренней колебательной энергии  $\epsilon$  в различные моменты времени.

не может оказать сколь-нибудь значимое влияние на измеряемые величины  $\tau_a$ .

### Список литературы:

1. Stockett M.H., Bull J.N., Schmidt H.T., Zettergren H. Statistical vibrational autodetachment and radiative cooling rates of para-benzoquinone // Phys. Chem. Chem. Phys., 2022, V. 24, P. 12002-12010.

## Перспективные органические материалы, явления на поверхности, границах раздела и в тонких пленках



**SOLUTION PROCESSED 2D HYBRID CHARGE TRANSFER COMPLEXES  
FOR OPTO-ELECTRONICS APPLICATION<sup>1</sup>**

Kukhta A.V.<sup>a</sup>, Valynets N.I.<sup>a</sup>, Maksimenko S.A.<sup>a</sup>, Pavich T.A.<sup>b</sup>, Lugovsky A.P.<sup>c</sup>,  
Li Z.Q.<sup>d</sup>, Fang X.S.<sup>d</sup>

<sup>a</sup>*Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University, 220006, Belarus,  
Minsk, Babruiskaya Str. 11, e-mail: kukhta@bsu.by, al.kukhta@gmail.com*

<sup>b</sup>*B.I.Stepanov Institute of Physics, National Academy of Sciences of Belarus, Belarus,  
220070 Minsk, Nezalezhnastsi Ave. 70, e-mail: pavich54@mail.ru*

<sup>c</sup>*Institute for Applied Physical Problems, Belarusian State University,  
220108, Belarus, Minsk, Kurchatova Str. 7, e-mail: an.lugovsky@yandex.ru*

<sup>d</sup>*Fudan University, 200433, China, Shanghai, Handan Rd 220,  
e-mail: xsfang@fudan.edu.cn*

We proposed a number of new charge transfer complexes based on 2D nanoplatelets (graphene oxide or MoS<sub>2</sub>) and luminescent organic aromatic molecules. Optical and electrophysical measurements, and DFT calculations (in the framework of Gaussian program package) confirm a charge transfer nature of the electronic transitions in these compounds. Optical properties and good film forming ability of these materials as well as the possibility to obtain photogating effect are very attractive for their wide applications in optoelectronics. The simple and reliable proposed procedure is prone to be easily scaled up and open the route for the commercialization of these nanomaterials.

---

<sup>1</sup> This work has been supported by the Belarusian Foundation for Fundamental Research, Project No T23KI-004, and the National Natural Science Foundation of China, Project No.12211530438.

## ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ СИСТЕМА АНАЛИЗА ДАННЫХ СЕНСОРОВ НЕРАЗРУШАЮЩЕГО КОНТРОЛЯ

Буланкин Н.С.<sup>a</sup>, Галиев А.Ф.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>*Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы,  
450077, Россия, Уфа, ул. Окт. Революции 3а, e-mail: animekawai00@mail.ru*

<sup>b</sup>*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: azat-red@ya.ru*

Интеллектуальные сенсорные системы актуальны для применения в любых областях, где требуется экспресс-анализ состояния системы. Это может быть пищевая промышленность [1], где требуется быстрое обнаружение предельно допустимых концентраций вредных веществ или наличие следов жизнедеятельности микроорганизмов. Другой перспективной областью применения является неразрушающий контроль состояния металлических изделий и сооружений [2], которые предполагают наличие антикоррозионных покрытий. В этой связи, предлагается формирование на поверхности металла покрытия из электроактивной полимерной пленки, исследуя импедансные характеристики которой можно делать вывод о процессах, происходящих в металле.

В работе представлены результаты разработки и применения нейросетевых алгоритмов анализа данных сенсоров неразрушающего контроля металлов, работающих на импедиметрическом принципе. Нейросетевые алгоритмы были разработаны в среде программирования Python. Показана возможность применения нейросети для анализа величины упругой деформации металлического образца.

### Список литературы:

1. Aliev T.A. Belyaev V.E., Pomytkina A.V., Nesterov P.V., Shityakov S., Sadovnichii R.V., Novikov A.S., Orlova O.Yu., Masalovich M.S., Skorb E.V. Electrochemical Sensor to Detect Antibiotics in Milk Based on Machine Learning Algorithms // ACS Applied Materials & Interfaces, 2023, V. 15 (44), P. 52010-52020.
2. Bongiorno V., Michailidou E., Curioni M. Towards the automated interpretation of impedance spectra from organic coatings using neural networks // Corrosion Science, 2024, V. 230. P. 111922.

## СПЕКТРЫ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ТОНКИХ ПЛЁНОК СОПОЛИАРИЛЕНЭФИРКЕТОНОВ

Бунаков Н.А.<sup>a</sup>, Бунаков А.А.<sup>b</sup>, Шапошникова В.В.<sup>c</sup>,  
Салазкин Н.С.<sup>c</sup>, Карамов Д.Д.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Акмуллинский университет, 450077, Уфа, ул. Октябрьской революции 3-а,  
e-mail: nikbun99@gmail.com

<sup>b</sup> ИФМК УФИЦ РАН, 450075, Уфа, пр. Октября 151

<sup>c</sup> ИНЭОС РАН, 119334, Москва, ул. Вавилова, д. 28, стр. 1.

Среди полимеров класса полигетероариленов – термопластичные фталидсодержащие (со)полиариленэфиркетоны, обладают перспективными в практических приложениях оптическими и электрофизическими свойствами [1].

В данной работе представлены результаты исследования спектров люминесценции пленок сополиариленэфиркетонов (Со-ПАЭК) с различным содержанием базовой изопропилиденовой группы и боковых флуореновых групп (рис. 1). Подобные исследования позволяют выявить влияние строения молекулы полимера на спектры люминесценции, а, следовательно, и на распределение ловушечных состояний в запрещенной зоне полимера.

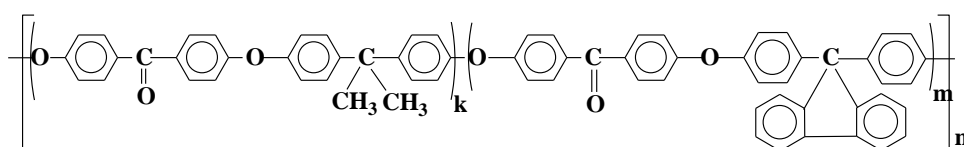


Рис.1. Структурная формула флуоренсодержащих полиариленэфиркетонов.

Для проведения оптических исследований, пленки Со-ПАЭК изготавливались методом центрифугирования из раствора в циклогексаноне на кварцевых подложках. Процесс удаления остатков растворителя проводился в два этапа: при комнатной температуре в течение 30-45 мин, затем в сушильном шкафу при температуре 150°C в течение 10 часов в условиях предварительного вакуума.

### Список литературы:

1. Lachinov A.N., Karamov D.D., Galiev A.F., Salazkin S.N., Shaposhnikova V.V., Kost T.N., Chebotareva A.B. Non-Conjugated Copoly (Arylene Ether Ketone) for the Current-Collecting System of a Solar Cell with Indium Tin Oxide Electrode// Polymers, 2023, 15(4), P. 928.

## СТАТИСТИКА РЕЛЬЕФА СКРЫТЫХ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА ПЛЁНОК ИТО-PMDA ПО ДАННЫМ СКОЛЬЗЯЩЕГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ<sup>1</sup>

Волков Ю.О.<sup>a</sup>, Нуждин А.Д.<sup>a</sup>, Рощин Б.С.<sup>a</sup>, Жукович-Гордеева А.А.<sup>b</sup>,  
Пожидаев Е.П.<sup>b</sup>, Асадчиков В.Е.<sup>a</sup>, Островский Б.И.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>НИЦ «Курчатовский институт», 123182 Россия, Москва,  
пл. Академика Курчатова, д. 1, e-mail: volkov.y@crys.ras.ru

<sup>b</sup>Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 119333 Россия, Москва,  
Ленинский проспект, д. 53, e-mail: epozhidev@mail.ru.

Структура элемента жидкокристаллической ячейки, состоящего из совокупности плёнок оксида индия-олова (ИТО), полипиромеллитового диангидрида (PMDA) и жидкого кристалла FLC-497 на стеклянной подложке, была изучена комбинированным рентгеновским методом, включающим рентгеновскую рефлектометрию и незеркальное рентгеновское рассеяние в скользящем падении [1]. Преимущество данного метода заключается в возможности разделения вклада шероховатости и переходного слоя в строение границы раздела [2]. Рассчитанные распределения оптической постоянной по глубине  $\chi(z)$  показывают, что на границе ИТО-PMDA и PMDA-LCD присутствуют нарушенные слои пониженной плотности толщиной до 1.5 нм. Спектры рельефа интерфейсов  $S(v)$  показывают увеличение эффективной высоты шероховатости с 0.9 нм для поверхности подложки до 1.4 нм для поверхности ИТО и 4.8 нм для поверхности PMDA, при этом эффективный коэффициент кросс-корреляции  $K_c$  подложка-ИТО составил  $\approx 0.85$  и  $K_c$  ИТО-PMDA  $\approx 0.27$  соответственно.

### Список литературы:

1. Kozhevnikov I.V Analysis of X-ray scattering from a rough multilayer mirror in the first-order perturbation theory // Nuclear Instrum. Meth. Phys. Res. A, 2003, V. 498, P. 482-495.
2. Kozhevnikov I.V, Peverini L., Ziegler E. Development of a self-consistent free-form approach for studying the three-dimensional morphology of a thin film // Phys. Rev. B, 2012, V. 85, P. 125439.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена в рамках государственного задания НИЦ «Курчатовский институт».

## ПРИМЕНЕНИЕ АДДИТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПЛЕНОК ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДОВ

Галиев А.Ф.<sup>a,b</sup>, Ишмухаметов М.С.<sup>a</sup>, Буланкин Н.С.<sup>a</sup>,  
Шарафеев Р.В.<sup>a</sup>, Лачинов А.А.<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы,  
450077, Россия, Уфа, ул. Окт. Революции 3а, e-mail: azat-red@ya.ru

<sup>b</sup>Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151

Сополимеры полиарилефталидов являются перспективными материалами для гибкой электроники, так как обладают рядом особенностей: возможность настройки электронных свойств от диэлектрического до состояния с высокой проводимостью, хорошие пленкообразующие свойства, химическая и температурная стабильность [1]. Недавно продемонстрирована возможность использования данных сополимеров в качестве токосъемных пленок для солнечных элементов [2]. При этом, эти материалы могут быть пригодны для 3D-печати методом послойного осаждения, так как температура размягчения находится в области привычной для аддитивной технологии температур 170-260 °С, а температура начала разложения выше на 30-50 °С. Однако до сих пор такая возможность не рассматривалась. В этой связи, разработка метода печати сополимеров полиарилефталидов позволит создать элементы гибкой электроники и сенсоры, перспективные к применению в робототехнике и носимой электронике.

В работе показана возможность создания функциональных слоев полиарилефталидов методом послойного осаждения. Получено, что при температуре печати 210 °С, можно получить слои толщиной от 1 до 5 мкм, а также показана возможность прямой печати сенсоров окружающей среды.

### Список литературы:

1. Шапошникова В.В., Салазкин С.Н. Направленный синтез термо-и терлостойких полиарилефталидов, обладающих комплексом ценных функциональных свойств // Российский химический журнал, 2023, Т. 67, №4., С. 37–42.
2. Lachinov A.N., Karamov D.D., Galiev A.F., Salazkin S.N., Shaposhnikova V.V., Kost T.N., Chebotareva A.B. Non-Conjugated Copoly (Arylene Ether Ketone) for the Current-Collecting System of a Solar Cell with Indium Tin Oxide Electrode // Polymers, 2023, V.15(4), P. 928.

## ГАЗОВЫЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ПЛЕНОК ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИДА

Давлятгареев Х.И.<sup>a,c</sup>, Карамов Д.Д.<sup>b,c</sup>, Байбулова Г.Ш.<sup>c</sup>, Лачинов А.А.<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Общество с ограниченной ответственностью «ПОЛИСЕНСОР»,  
452883, Россия, РБ, Аскинский р-н, с. Кизазы, ул. Ключевая, д.8,  
e-mail: info@polysensor.ru

<sup>b</sup>Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, 450075, Россия, Уфа,  
пр. Октября 151, e-mail: conf-itcr@anrb.ru

<sup>c</sup>Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы,  
450077, Россия, Уфа, ул. Октябрьской революции, 3-а, e-mail: office@bspu.ru

На сегодняшний день исследование и разработка новых селективных химических сенсоров на основе органических функциональных материалов является развивающимся направлением электроники.

В работе представлены результаты исследования газового сенсора на основе двух полимерных пленок группы полиариленфталидов. При последовательном нанесении полимерных пленок друг на друга возникает упорядоченный квазидвумерный слой, формирующий продольный токопроводящий канал. Установлено, что параметры носителей заряда вдоль такого слоя сильно зависят от воздействия внешней среды, в частности от ее химического состава. Электрическое сопротивление чувствительного слоя изменяется при изменении состава контактирующей атмосферы.

В работе представлены результаты оценки коэффициента адсорбционного равновесия, чувствительности полимерного слоя при воздействии паров этанола и изопропанола.

### Список литературы:

1. Hwang B.J., Yang J.Y., Lin C.W. A microscopic gas-sensing model for ethanol sensors based on conductive polymer composites from polypyrrole and poly (ethylene oxide) //Journal of The Electrochemical Society 1999, V. 146, № 3, P. 1231.

**ФОРМИРОВАНИЕ И СВОЙСТВА ИНЖЕКТИРУЮЩИХ  
КОНТАКТОВ ДЛЯ УСТРОЙСТВ ОРГАНИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ  
НА ОСНОВЕ ПЛЕНОК  $\text{MoO}_3$  <sup>1</sup>**

*Дубов Е.А.<sup>a</sup>, Убович М.<sup>a</sup>, Таюпов М.М.<sup>b</sup>, Комолов А.С.<sup>a</sup>*

*<sup>a</sup>Санкт-Петербургский государственный университет,  
199034, Россия, Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7–9  
e-mail: eugene.dbv@gmail.com*

*<sup>b</sup>Институт физики молекул и кристаллов –  
обособленное структурное подразделение  
Уфимского федерального исследовательского центра РАН, Уфа, Россия*

Целью исследования было установление влияния условий синтеза и воздействия атмосферы на атомный состав, работу выхода, топографию и структуру поверхности  $\text{MoO}_3$ , сформированного методом магнетронного распыления. В ходе работы были синтезированы пленки  $\text{MoO}_3$  толщиной 10 нм и 150 нм. Анализ химического состава и установление значений работы выхода проводили методом фотоэлектронной спектроскопии (ФЭС), контроль кристаллической структуры осуществлялся методом дифракции рентгеновских лучей (XRD), морфология поверхности определялась методом атомно-силовой микроскопии (АСМ). Установлено, что характерная работа выхода исследованных пленок  $\text{MoO}_3$  лежит в диапазоне 6-7 эВ, что и является предметом особого интереса в области использования  $\text{MoO}_3$  в качестве дырочного инжектирующего электрода в устройствах органической электроники. Методом ФЭС установлена относительная концентрация атомов молибдена и кислорода как 1:3, что соответствует стехиометрии  $\text{MoO}_3$ . Средняя шероховатость образцов по данным АСМ составляет 1 нм. Согласно методу XRD образец толщиной 150 нм имеет аморфную структуру.

---

<sup>1</sup> Работа проведена с использованием оборудования Научного парка СПбГУ "Физические методы исследования поверхности", "Рентгенодифракционные методы исследования" и "Диагностика функциональных материалов для медицины, фармакологии и нанoeлектроники".

## ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ СПИН 1/2 ВОЗБУЖДЕННЫХ ОКТУПОЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ<sup>1</sup>

Иванов А.И.

*Волгоградский государственный университет, 400062, Россия, Волгоград,  
пр. Университетский 100, e-mail: anatoly.ivanov@volsu.ru.*

Донорно-акцепторные (ДА) агрегаты интенсивно исследуются на протяжении нескольких десятилетий и находят широкое применение в различных органических оптоэлектронных устройствах. В таких структурах имеются возбужденные состояния с переносом заряда (близкого к заряду электрона) с донора на акцептор. Фотовозбуждение октупольных молекул вида D-A<sub>3</sub>, имеющих ось симметрии третьего порядка, ведет к образованию состояния, в котором заряд, перенесенный с донора, распределяется на всех трех акцепторах. Нижние возбужденные состояния имеют характерную мультиплетную структуру, обусловленную давидовским расщеплением. В октупольных молекулах это приводит к полносимметричному состоянию и вырожденному неполносимметричному дублету [1,2]. Характерное время жизни дублетного состояния составляет несколько наносекунд. В докладе показано, что это дублетное состояние обладает всеми свойствами спина 1/2, с которым связан большой электрический дипольный момент (электрический спин). Обсуждается эффект Яна-Теллера и его влияние на энергетическую структуру возбужденных октупольных молекул. Рассмотрены характерные времена изменений состояний электрического спина с помощью электромагнитных полей. Анализируется возможность реализации кубита на основе возбужденных октупольных молекул.

### Список литературы:

1. Ivanov A.I. Symmetry breaking charge transfer in excited multibranch molecules and dimers: A unified standpoint. //J. Photochem. Photobiol. C: Photochemistry Reviews. 2024, V. 58, P. 100651.
2. Siplivy N.B., Ivanov A.I. The effect of energy level degeneracy on symmetry-breaking charge transfer: Excited octupolar dyes. //J. Chem. Phys. 2023, V. 158, P. 164301.

---

<sup>1</sup> Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-13-00180, <https://rscf.ru/project/22-13-00180>.

## ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ФОРМИРОВАНИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИДА НА ТОКИ ТСД

Ильясов В.Х.<sup>a</sup>, Карамов Д.Д.<sup>b</sup>, Лачинов А.Н.<sup>b</sup>, Пономарев А.Ф.<sup>c</sup>,  
Шамбулина В.Н.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*Ухтинский государственный технический университет,  
169300, Россия, Ухта, ул. Первомайская, 13, e-mail: pt22\_ilyasvh@list.ru*

<sup>b</sup>*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: karamov\_danf@bk.ru*

<sup>c</sup>*Уфимский университет науки и технологий Бирский филиал,  
452453, Россия, Бирск, ул. Интернациональная, 10*

Ранее было установлено несколько процессов отвечающих за релаксацию заряда пленок полидифениленфталида (ПДФ): дипольная поляризация, проявляющая себя при низких температурах, формирование объемного заряда, захваченного на ловушки, и приповерхностного заряда [1]. Также показано, что внешнее магнитное поле может оказывать сильное влияние на перенос заряда в объеме тонких пленок в системе Ni-полимер-Cu [2].

В данной работе впервые рассматривается вопрос о возможности управления энергетическими характеристиками тонких пленок ПДФ, путем воздействия постоянного магнитного поля (300 мТл) в процессе формирования пленок. Исследования энергетических параметров проводились методом термостимулированных токов деполяризации (ТСД).

Полученные результаты можно объяснить ориентацией диполей вдоль магнитного поля и определенному порядку формирования ловушечных состояний в объеме полимерной пленки. Природа данного механизма до конца не изучена и требует дальнейшего исследования и анализа полученного экспериментального материала.

### Список литературы:

1. Лачинов А.Н., Ильясов В.Х. О механизмах термостимулированной деполяризации в полидифениленфталите // Химическая физика, 2009, Т. 28, № 8, С. 78-83.
2. Лачинов А.Н., Воробьева Н.В. Особенности гигантского магнитосопротивления в системе ферромагнетик – полимер // Письма в ЖЭТФ, 2006, Т. 84, В. 11, С. 720.

## **ИМПЕДИМЕТРИЧЕСКИЙ ТОНКОПЛЕНОЧНЫЙ СЕНСОР НЕРАЗРУШАЮЩЕГО КОНТРОЛЯ ДЕФОРМАЦИИ МЕТАЛЛОВ**

Ишмухаметов М.С.<sup>a</sup>, Каримов Р.Х.<sup>a</sup>, Каримов В.Р.<sup>a</sup>, Галиев А.Ф.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>*Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы,  
450077, Россия, Уфа, ул. Окт. Революции 3а, e-mail: swordmaster2028@gmail.ru*

<sup>b</sup>*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151*

Предложен новый метод неразрушающей диагностики состояния металлов, основанный на анализе импедансной характеристики структуры металл/полимер/металл. Локальные изменения электронных характеристик, в частности эффективной работы выхода электрона, на поверхности тестируемого металла приводят к изменению процессов переноса заряда на границе раздела металл/полимер, что в свою очередь, может быть количественно и качественно оценено по частотной зависимости импеданса структуры. Получено, что для пленок толщиной более 1 мкм, наблюдается преимущественно изменение емкости структуры. В то же время, для пленок толщиной менее 1 мкм наблюдается изменение активной составляющей сопротивления, а относительное изменение сопротивления может достигать более 5 порядков. Кроме того, метод может быть применен для исследования переноса заряда в самих полимерных пленках, так как наряду с времяпролетными измерениями (CELIV), а также анализом вольт-амперной характеристики, позволяет получать данные о подвижности носителей зарядов, а также о наличии поверхностной поляризации и ее вклада в изменение величины потенциального барьера на границе раздела металл/полимер [1].

Результаты работы могут быть использованы для разработки сенсора неразрушающего контроля металлов, позволяющий оценить степень упругой деформации.

### **Список литературы:**

1. Jiang D., Sun J., Ma R., Wong V.K., Yuan J., Gao K. Chen F., So S.K., Hao X., Li G., Yin H. Extracting charge carrier mobility in organic solar cells through space-charge-limited current measurements // Materials Science and Engineering: R: Reports, 2024, V. 157, P. 100772.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЕНОК СОПАЭК ПРИ ТЕРМИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ<sup>1</sup>

Карамов Д.Д.<sup>a,b</sup>, Галиев А.Ф.<sup>a,b</sup>, Шапошникова В.В.<sup>a,c</sup>, Чеботарева А.Б.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> НИИЯФ МГУ, 119234, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, дом 1, строение 2

<sup>b</sup> ИФМК УФИЦ РАН, 450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151

<sup>c</sup> ИНЭОС РАН, 119334, Москва, ул. Вавилова, д. 28, стр. 1.

В настоящее время в фотовольтаике активно развиваются новые подходы к формированию токосъемных контактов к солнечным элементам из прозрачных материалов с применением экономичных низкотемпературных процессов с сокращением использования серебра. Одними из перспективных адгезивных материалов для прикрепления металлической контактной сетки являются кардовые полиариленэфиркетоны (ПАЭК), содержащие боковые флуореновые группы. Данные полимеры спонтанно переключаются из диэлектрического в высокопроводящее состояние в ходе низкотемпературной ламинации при небольшом избыточном давлении [1].

Для исследования влияния изменения температуры на электрофизические характеристики тонких пленок со-ПАЭК применен метод измерения ВАХ в термодинамически неравновесных условиях. Температура образца возрастала со скоростью ~1 К/мин в интервале от 300 до 500 К. Установлено, что при медленном повышении температуры, когда термостимулированные токи имеют незначительную величину, переход в состояние высокой проводимости не происходит. Это свидетельствует о том, что увеличение температуры не обеспечивает достаточную энергию для эффективной термоионизации ловушек и освобождения заряженных частиц. В результате пленки остаются в диэлектрическом состоянии и не достигают металлоподобной проводимости.

### Список литературы:

1. Lachinov A.N., Karamov D.D., Galiev A.F., Salazkin S.N., Shaposhnikova V.V., Kost T.N., Chebotareva A.B. Non-Conjugated Copoly (Arylene Ether Ketone) for the Current-Collecting System of a Solar Cell with Indium Tin Oxide Electrode // *Polymers*, 2023, V. 15(4), P. 928.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 22-19-00535.  
<https://rscf.ru/project/22-19-00535>.

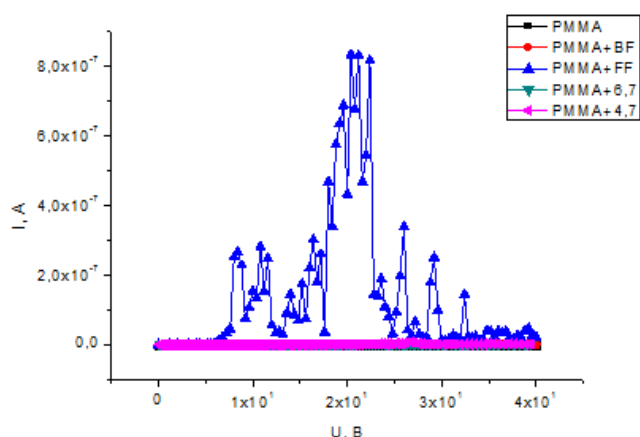
## ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА

Квашнина Е.О., Корнилов В.М.

ФГБОУ ВО БГПУ им.М.Акмиллы, 450008, Россия, г.Уфа,  
ул. Октябрьской Революции, 3Ак2, e-mail: KvashninaEkaterina@yandex.ru.

Исследование электрофизических свойств тонких пленок является актуальной и перспективной областью научных исследований в современном мире.

Целью данной работы является изучение переноса заряда в тонких пленках полиметилметакрилата. В данной работе исследована структура Al/полимер+допант/Al. В качестве полимера выбран полиметилметакрилат. В качестве допанта – молекулы фенолфталеина (ФФ); 3-бензилиденфталида (БФ); 6,7-дигидроксикумарина и 4,7-дигидроксикумарина. Концентрация допанта составляла 7 вес.%. Для оценки электрических свойств на структурах Al/ПММА+Доп/Al измерялись вольтамперные характеристики при помощи зондовой станции MPI TS50 источником–измерителем Keysight B2902A.



**Рис. 1.** Вольт-амперная характеристика структуры Al/ПММА+Доп/Al: 1–ПММА; 2–ПММА+БФ; 3– ПММА+ФФ; 4– ПММА+6,7; 5– ПММА+4,7.

Сравнительный анализ вольтамперных характеристик показал, что при достижении порогового значения напряжения, за квадратичным участком, возникает увеличение тока [1]. Морфологические особенности полимерных пленок контролировались методом атомно–силовой микроскопии сканирующим мультимикроскопом СММ–2000Т. В докладе будут пред-

ставлены результаты, полученные в рамках теории ТООЗ, а также их обсуждение.

### Список литературы:

1. Лачинов А.Н., Жеребов А.Ю., Корнилов В.М. Высокотокпроводящее состояние в тонких пленках полимеров // ЖЭТФ, 1992, Т. 102, №. 1, С. 187.

**ЭЛЕКТРОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ КАК КОМПЛЕКС МЕТОДОВ ДЛЯ  
УСТАНОВЛЕНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ПРОФИЛЯ ОБЛАСТЕЙ  
ТРАНСПОРТА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В СВЕРХТОНКИХ  
ОРГАНИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ НА ПОВЕРХНОСТИ БИНАРНЫХ  
ПОЛУПРОВОДНИКОВ<sup>1</sup>**

Комолов А.С.<sup>a</sup>, Пронин И.А.<sup>b</sup>, Пшеничнюк С.А.<sup>c</sup>, Дубов Е.А.<sup>a</sup>,  
Соболев В.С.<sup>a</sup>, Комолова А.А.<sup>a</sup>, Лазнева Э.Ф.<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*Санкт-Петербургский государственный университет, Россия, Санкт-Петербург, Университетская набережная, 7–9, e-mail: a.komolov@spbu.ru*

<sup>b</sup>*Пензенский государственный университет,  
Россия, Пенза, ул. Красная, 40, e-mail: pronin\_i90@mail.ru*

<sup>c</sup>*ИФМК УФИЦ РАН, Россия, Уфа, пр-кт Октября, 151, e-mail: sapsh@anrb.ru*

В докладе представлено описание подходов к исследованию энергетического положения максимумов валентной зоны и зоны проводимости полупроводниковых органических материалов с использованием методов фотоэлектронной спектроскопии и электронной спектроскопии полного тока. Рассмотрены возможности применения этих методик для установления высоты и протяженности пограничного потенциального барьера на примере серии интерфейсных структур на основе пленок тиенотиофенов, антраценов, толщиной до 10 нм, на следующих подложках: SiO<sub>2</sub>, Au, CdS, ZnO, MoO<sub>3</sub>. Представлены результаты по характеристике полупроводниковых и органических слоев с помощью методов рентгеноструктурного анализа, анализа атомного состава и анализа топографии поверхности.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект №124041700069-0. В работе использовали оборудование Научного парка СПбГУ "Физические методы исследования поверхности", "Рентгенодифракционные методы исследования" и "Диагностика функциональных материалов для медицины, фармакологии и нанoeлектроники".

## ИССЛЕДОВАНИЕ КВАЗИОДНОМЕРНЫХ ПРОВОДЯЩИХ СТРУКТУР В ПОЛИМЕРНЫХ СЛОЯХ

Корнилов В.М.<sup>а</sup>, Карамов Д.Д.<sup>б</sup>

<sup>а</sup> *Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы, 450008, Россия, Уфа, ул. Октябрьской революции, 3а, e-mail: kornilov@anrb.ru*

<sup>б</sup> *Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, 450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: karamov\_danfjs@bk.ru*

В связи с развитием нанофизики и нанoeлектроники совершенствуются и методы формирования объектов и структур пониженной размерности. Известен круг явлений (эффекты переключения), позволяющий создавать электропроводящие нанометровые области (каналы) в диэлектрической матрице. В течение ряда лет исследовались эффекты переключения при различных внешних воздействиях в субмикронных пленках полимеров из группы полигетероариленов [1]. В работе [2] было показано, что при кратковременном облучении полимерной пленки на плоской кремниевой подложке ионами с энергией 4-6 кэВ возникает самоподдерживающаяся электронная эмиссия. Было установлено, что электронная эмиссия является следствием резистивного переключения. Использование методик локального переключения в сочетании с методиками атомно-силовой микроскопии с проводящим зондом позволили выйти на исследование электрофизических свойств отдельных проводящих каналов.

Были определены основные характеристики локального резистивного переключения: зависимость от напряжения на образце; зависимость тока от толщины полимерной пленки; зависимость тока от времени.

В результате работы удалось визуализировать электропроводящие участки нанометровых размеров в диэлектрической полимерной матрице. Методы атомно-силовой микроскопии с проводящим зондом позволили определить линейные размеры проводящих каналов, величину и плотность тока в каналах.

### Список литературы:

1. Лачинов А.Н., Воробьева Н.В. // УФН, 2006, Т. 176, № 12, С. 1249.
2. Корнилов В.М., Лачинов А.Н., Логинов Б.А., Беспалов В.А. // ЖТФ, 2009, Т. 79, С. 116.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА МЕТАЛЛ-ПОЛИМЕР-МЕТАЛЛ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ МАТЕРИАЛАХ ЭЛЕКТРОДОВ

Миргалина Э.А.<sup>а</sup>, Бунаков А.А.<sup>б</sup>

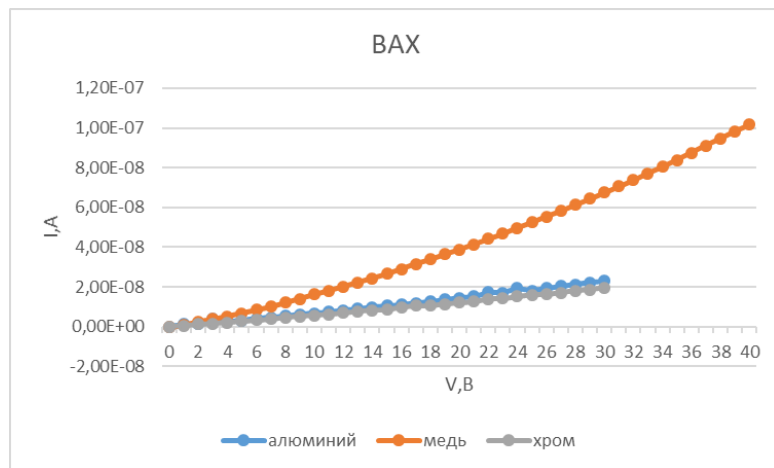
<sup>а</sup>ФГБУ ВО БГПУ им. М. Акмуллы,

Институт физики, математики, цифровых и нанотехнологий, Россия, г. Уфа,  
ул. Октябрьской революции, 3а, 2 к. e-mail: emtamirgalina836@gmail.ru

<sup>б</sup>Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 71, e-mail: andbun@mail.ru.

Цель работы заключалась в анализе влияния различных материалов электрода на электрофизические свойства границы раздела металл-полимер-металл при использовании различных материалах электродов.

В качестве электродов использовали медь, алюминий, хром, а в качестве полимера – полидифениленфталид (ПДФ). ПДФ - это высокопрочный полимер, обладающий термической и химической стойкостью, а также хорошими меха-



**Рис. 1.** Вольт-амперные характеристики структуры металл-полимер-металл в зависимости от материала электродов.

медных электродов показали лучшую адгезию. Граница раздела медь-ПДФ показала хорошие электрические свойства, что влияет на проводимость и стабильность работы структуры.

### Список литературы:

1. Бунаков А.А., Лачинов А.Н., Салихов Р.Б. Исследование вольтамперных характеристик тонких пленок полидифениленфталида // ЖТФ, 2003, V. 73, N. 5, P. 104–108.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВКЛАДА ГРАФЕНА НА ИЗМЕНЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЁНОК ПОЛИДИФЕНИЛЕНФТАЛИДА (ПДФ)

Мукминова Р.Р., Каримов Р.Х., Юсупов А.Р.

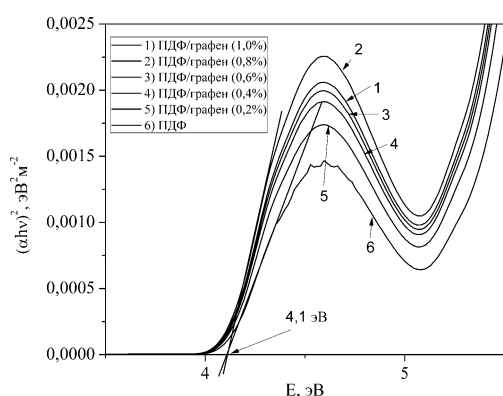
*«ФГБУ ВО БГПУ им. М. Акмуллы,*

*Институт физики, математики, цифровых и нанотехнологий, Россия,  
г. Уфа, Октябрьская революция 3а 2 к. e-mail: mukminova.regina.01@mail.ru*

Возможность применения полимерных материалов в электронике, существенно зависит от их электропроводности, повышение которой возможно путем допирования исходного материала атомами металлов и др. элементов.

Целью настоящей работы является исследование влияния добавки графена RG-S1 на электрофизические и оптические свойства ПДФ[1]. В качестве основных методов исследования были выбраны методы исследования оптических спектров поглощения и спектров флуоресценции.

Спектры поглощения измерялись на спектрофотометре Shimadzu UV – 1800. Полученные спектры, перестроенные в координатах Тауца представлены на Рис. 1. По краю оптического поглощения в рамках метода Тауца, была проведена оценка оптической ширины запрещенной зоны, значение которой составило ~4,1 эВ для всех экспериментальных образцов.



**Рис.1.** Зависимость интенсивности поглощения образцов от энергии падающего излучения.

Измерения спектров флуоресценции проводили на спектрофлуориметре OmniFluo-900 при двух значениях длин волн возбуждения 270 нм и 300 нм.

В докладе будут представлены результаты, полученные в рамках изучения спектров флуоресценции, а также их обсуждение.

### Список литературы:

1. Лачинов А.Н., Воробьева Н.В. Электроника тонких слоев широкозонных полимеров // УФН, 2006, Т. 176:12, С. 1249-1266.

## **ИЗМЕНЕНИЕ СТРУКТУРЫ ПЛЕНКИ ДИМИРИСТОЙЛ- ФОСФАТИДИЛСЕРИНА НА ПОВЕРХНОСТИ КОЛЛОИДНОГО РАСТВОРА КРЕМНЕЗЕМА В ПРОЦЕССЕ ЕЕ ПЛАВЛЕНИЯ**

Нуждин А.Д.<sup>a</sup>, Асадчиков В.Е.<sup>a</sup>, Волков Ю.О.<sup>a</sup>, Роцин Б.С.<sup>a</sup>, Тихонов А.М.<sup>b</sup>

<sup>a</sup>*Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники НИЦ "Курчатовский институт", 119333, Россия, Москва, Ленинский проспект, 59. e-mail: nuzhdin.a@crys.ras.ru*

<sup>b</sup>*Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН, 119334 Россия, Москва, ул. Косыгина, 2.*

Работа выполнена с использованием методов рентгеновской рефлектометрии, рассеяния и скользящей дифракции на синхротронном источнике, а также совместного применения модельного и безмодельного подхода к анализу данных [1]. Наночастицы в подложке являются макроионами, и образуют на поверхности раствора широкий электрический двойной слой. Электрическое поле ориентирует молекулы-диполи нанесенного на раствор липида. При изменении концентрации раствора возможно получать липидные би- и мультислои, представляющие интерес как модельные структуры – макроскопически плоские аналоги биологических мембран. Для пленки димиристойл-фосфатидилсерина (DMPS) установлено, что её структура состоит из поверхностного липидного монослоя и набора квазипериодических ламеллярных бислоев, зажатых между слоями воды с периодом  $\sim 150$  Å. Проведено исследование динамики изменения структуры мультислоев DMPS на поверхности кремнеземного гидрозоля (диаметр частиц  $\approx 5$  нм) в процессе нагрева образца до достижения фазового перехода фосфолипида в жидкую фазу, при котором утрачивается квазипериодичность.

### **Список литературы:**

1. Kozhevnikov I.V., Peverini L., Ziegler E. Development of a self-consistent free-form approach for studying the three-dimensional morphology of a thin film // Phys. Rev. B., 2012, V. 85, № 12, P. 125439.

---

<sup>1</sup>Работа выполнена в рамках комплексной темы 3Ф-КИФ.7. и государственного задания Института физических проблем РАН, измерения проводились в рамках проекта ESRF SC-4845.

## ТОНКОПЛЕНОЧНЫЕ НАНОКОМПОЗИТНЫЕ СТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ПОИАНИЛИНА

Остальцова А.Д., Салихов Р.Б.

*Уфимский университет науки и технологии, 450076, Россия,  
г. Уфа, ул. Заки Валиди, дом 32, e-mail: nastia-ostaltsova@yandex.ru*

Современные полимеры вызывают большой интерес в области создания электронных датчиков благодаря таким своим качествам, как невысокая стоимость, лёгкость изготовления и возможность относительно без труда менять их свойства путём добавления нужных компонентов [1-2]. Образцы резистивных тонкопленочных структур были изготовлены на основе полимерных производных ПАНИ (Р1 и Р2). Проверили пленки на влажность воздуха. Р2 начинает реагировать на влажность уже при 30% благодаря своей пористой структуре. Рост тока в образцах с Р1 начинается только при 50%, он характеризуется резким увеличением тока, а максимальное значение в 3 раза превышает соответствующее значение для образцов с Р2. Согласно полученным данным, пленка образца Р1 обладает самой высокой электропроводностью при тех же значениях относительной влажности. Пленки производных полианилина реагируют на присутствие паров аммиака в окружающей среде, уменьшая протекающий ток. Полученные результаты объясняются протонированием/депротонированием полимерной цепи. Предполагается, что при взаимодействии полимера с  $\text{NH}_3$  молекулы аммиака поглощают протоны из PANI, образуя энергетически выгодный аммоний ( $\text{NH}_4^+$ ), в результате чего происходит депротонирование PANI и снижается электропроводность.

### Список литературы:

1. Akhmetov A.R., Aminov R.I., Sadretdinov Z.R., Salikhov R.B., Mullagaliev I.N., Salikhov T. R. Covalent Binding of Fullerene C60 to Strained Polycyclic Hydrocarbons: Promising Organic Field-effect Transistors Based on them // *Current Organic Chemistry*, 2023, V. 27(14), P. 1277-1287.
2. Akhmetov A.R., Aminov R.I., Mullagaliev I.N., Salikhov R.B. Synthesis of Hybrid Molecules Based on Strained Polycyclic Hydrocarbons and C60 Fullerene: Application of Thin Films Based on Them in Organic Electronics // *Russian Journal of General Chemistry*, 2023, V. 93(9), P. 2193-2201.

## ЭТИОПОРФИРИНЫ: АГРЕГАЦИЯ И СВОЙСТВА В ТОНКИХ СЛОЯХ<sup>1</sup>

Пахомов Г.Л.<sup>a,b</sup>, Травкин В.В.<sup>a,b</sup>, Малясова А.С.<sup>b</sup>, Стужин П.А.<sup>b</sup>

<sup>a</sup> *Институт физики микроструктур РАН, 603950, Россия, Нижний Новгород, ГСП-105, e-mail: pakhomov@ipmras.ru*

<sup>b</sup> *Ивановский государственный химико-технологический университет, 153000, Россия, Иваново, Шереметьевский проспект 7*

подавляющее большинство устройств молекулярной электроники, как реально присутствующих на рынке, так и находящихся на стадии разработки – тонкопленочные устройства. Таким образом, «полезные» или «перспективные» свойства новых молекул должны оцениваться только через характеристики образуемых ими тонкопленочных фаз, основные из которых – сплошность и удельная электропроводность. Мы проводим цикл работ по исследованию твердотельных свойств этиопорфириновых металлокомплексов M-EtioP (M = Cu, Ni, InCl, VO) – синтетических аналогов петропорфиринов, с целью оценки перспектив их применения в органических фотовольтаических и фотодетектирующих устройствах [1-3].

В докладе представлены результаты исследований фазового строения, оптических и фотоэлектрических свойств тонких пленок M-EtioP полученных с помощью различных методов. Обсуждается роль центрального атома (группы) и региоизомерного состояния лиганда в формировании супрамолекулярных ансамблей, определяющих микроскопическую морфологию слоя, в том числе на разных функциональных подложках, и далее – на транспорт носителей заряда.

### Список литературы:

1. Коптыаев А.И., Zhabanov Y.A., Pakhomov G.L., Pershukevich P.P., Arabei S.M., Stuzhin P.A. Luminescence of In(III)Cl-etioporphyrin-I // International Journal of Molecular Sciences, 2023, V.24, №20, P. 15168.
2. Koifman O.I., Коптыаев А.И., Travkin V.V., Yunin P.A., Somov N.V., Masterov D.V., Pakhomov G.L. Aggregation and conductivity in hot-grown petroporphyrin films // Colloids and Interfaces, 2022, V.6, №4, P. 77.
3. Zhabanov Y.A., Eroshin A.V., Koifman O.I., Travkin V.V., Pakhomov G.L. Monomeric and Tetrameric Forms of Petroporphyrin VO-EtioP-III: Effect of Solid-State Aggregation on Electronic Absorption Spectra// Macroheterocycles, 2024, V.17, №1, P. 4-8.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда, проект №20-13-00285П.

## РАЗРАБОТКА ПОЛИРУЮЩЕЙ ПЛЕНКИ ЖИДКОГО СТЕКЛА И ОРГАНИЧЕСКИХ ОСНОВАНИЙ ДЛЯ ОПТИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ<sup>1</sup>

Петрова Д.В., Михайленко М.С., Зорина М.В., Дроздов М.Н.,  
Пестов А.Е., Чхало Н.И.

*Институт физики микроструктур РАН, 607680 Нижний Новгород, Россия,  
e-mail: petrovadar@ipmras.ru*

Обработка поверхности подложек оптических элементов для достижения оптимальных параметров формы и шероховатости, является важной технологической задачей. В качестве материала, позволяющего сформировать необходимую форму и шероховатость поверхности рентгенооптических элементов было предложено использовать растворы модифицированных «жидких стёкол» приготовленных на основе метасиликата натрия и органических оснований, таких как ТМАГ и мочевины. Исследовались составы жидкого стекла, нанесенные на поверхность хрома, никеля, кварца, с целью сглаживания шероховатости поверхности составов, а также стойкость покрытия к ионному травлению.

Наиболее значимые результаты были достигнуты при работе с хромовыми зеркалами, нанесенными на подложки кремния, при работе с раствором «стекла» на основе мочевины ( $\text{Na}_2\text{SiO}_3 + (\text{NH}_2)_2\text{CO}$ ). На пленках хрома толщиной 500 нм с исходной шероховатостью на уровне 3.9 нм в диапазоне пространственных частот 0.049–3.17 мкм<sup>-1</sup> и 3.6 нм в диапазоне 3.7–63.5 мкм<sup>-1</sup> после нанесения слоя жидкого стекла и ионной полировки (ускоренные ионы аргона с энергией 800 эВ и плотностью тока 0.7 мА/см<sup>2</sup> под нормалью к поверхности), удалось получить эффективную шероховатость 0.86 нм во всем диапазоне пространственных частот.

Результаты анализа молекулярной структуры пленки жидкого стекла на основе мочевины с помощью ВИМС, доказали полимерный состав наносимого покрытия.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 2172 30029

## НАНОКОМПОЗИТНЫЕ ТОНКОПЛЕНОЧНЫЕ СЕНСОРЫ

Салихов Р.Б., Остальцова А.Д., Салихов Т.Р.

*Уфимский университет науки и технологии, 450076, Россия,  
г. Уфа, ул. Заки Валиди, дом 32, e-mail: salikhovrb@ya.ru*

Одной из самых актуальных областей исследований и разработок в области нанотехнологий являются полимерные наноконпозиты. Полимерные наноконпозиты представляют собой важную категорию материалов, которые демонстрируют уникальные физико-химические свойства, недоступные отдельным компонентам [1-2]. На основе тонких пленок PEC-SWCNT (полиэлектролитного комплекса с одностенными углеродными нанотрубками) были получены многослойные структуры резистивных сенсоров. В резистивных датчиках в качестве подложки использовалась стеклянная подложка. На стеклянную подложку сверху были нанесены алюминиевые электроды методом термического распыления в вакуумной камере на установке УВП-250 толщиной около 400-500 нм, зазор создавался с помощью теневой маски. В область зазора между электродами в 50 мкм наносилась пленка полимера PEC-SWCNT. С помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) TESCAN MIRA LMS и программного обеспечения TESCAN Essence были получены изображения поверхности исследуемого полимера PEC-SWCNT. В отличие от поверхности чистого PEC, поверхность наноконпозитной структуры PEC-SWCNT, покрыта образованиями в виде нитей. Пленки производных PEC-SWCNT реагируют на присутствие паров аммиака в окружающей среде уменьшением протекающего тока.

### Список литературы:

1. Salikhov R.B., Mullagaliev I.N., Badretdinov B. R., Ostaltsova A.D., Sadykov T.T., Mustafin A.G. Effect of the morphology of films of polyaniline derivatives poly-2-[(2E)-1-methyl-2-butene-1-yl] aniline and poly-2-(cyclohex-2-en-1-yl) aniline on sensory sensitivity to humidity and ammonia vapors // Letters On Materials 2022, V. 12, P. 309-315.
2. Latypova L.R., Andriianova A.N., Usmanova G.S., Salikhov R.B., Mustafin A.G. Influence of copolymer composition on the properties of soluble poly (aniline-co-2-[2-chloro-1-methylbut-2-en-1-yl] aniline) s //Polymer International, 2023, V. 72, P. 440-450.

## МОДИФИКАЦИЯ ПОВЕРХНОСТИ ТОНКИХ ПЛЕНОК LiF/Si(111) ПРИ БОМБАРДИРОВКЕ ИОНАМИ ЦЕЗИЯ

Шаропов У.Б.<sup>a</sup>, Кахрамонов А.М.<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Физико-технический институт, АНРУз, 100084, Узбекистан,  
г. Ташкент, ул. Ч.Айтматова, 2Б, e-mail: utkirstar@gmail.com

<sup>b</sup>Институт Материаловедения АНРУз, 100084, Узбекистан,  
г. Ташкент, ул. Ч.Айтматова, 2Б, e-mail: alish@gmail.com

LiF используются для изоляции различных компонентов полупроводниковых устройств, таких как транзисторы, диоды и интегральные схемы, для предотвращения утечки тока и обеспечения их правильной работы.

Нами проведены цикл работ по изучению влияния ионов цезия (с энергией 1 кэВ) на тонкую пленку кристаллов LiF на кремнии. Программа SRIM/TRIM (Stopping and Range of Ions in Matter/Transport of Ions in Matter) является программным обеспечением для моделирования взаимодействия ионов с веществом [1]. Программа был использован для изучения поверхностных и структурных модификаций фторида лития исходя из коэффициента распыления и поверхностной энергии связи атомов.

Исследования показали возможность поверхностной модификации тонкой пленки при взаимодействии тяжелых низкоэнергетических ионов Cs с наночастицами LiF. Здесь средний пробег ионов цезия составил 51 Å. Опять же, средняя энергия поверхностной связи была получена как 2,8 эВ в результате исследования изменения выхода распыления в зависимости от энергии отдачи. Анализ событий столкновений также был выполнен с точки зрения смещения мишени, вакансий и столкновений замещения, который показывает, что облучение ионами смещает атомы из их исходного положения и создает вакансии в периодическом расположении.

### Список литературы:

1. Ziegler J.F., Ziegler M.D., Biersack J.P. SRIM—The stopping and range of ions in matter // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2010, V. 268, No. 11-12, P. 1818-1823.

## **ВЛИЯНИЕ МАССЫ ПЕРВИЧНОГО ИОНА НА ФОРМИРОВАНИЕ СПЕКТРОВ ПОЛНОГО ТОКА ВНЕДРЕННЫХ ДЕФЕКТОВ**

Шаропов У.Б.<sup>a</sup>, Кахрамонов А.М.<sup>b</sup>, Сафронов А.М.<sup>c</sup>

<sup>a</sup>*Физико технический институт, АНРУз, 100084, Узбекистан, г. Ташкент, ул. Ч.Айтматова, 2Б, e-mail: utkirstar@gmail.com*

<sup>b</sup>*Институт Материаловедения АНРУз, 100084, Узбекистан, г. Ташкент, ул. Ч.Айтматова, 2Б, e-mail: alish@gmail.com*

<sup>c</sup>*ИФМК УФИЦ РАН, Россия, г. Уфа, e-mail: sapsh@anrb.ru*

Экспериментальные исследования были проведены для изучения формирования внедренных дефектов на поверхности кристаллов LiF при облучении ионами различной массы, с применением методики спектроскопии полного тока. Результаты исследований показали, что при лобовом столкновении легких ионов с поверхностью происходит неупругое столкновение, в результате которого ион останавливается в приповерхностной области. В случае же тяжелых ионов, свободный пробег иона в кристалле зависит от энергии первичного иона, что приводит к их имплантации в объем кристалла.

Сравнительный анализ показал, что с увеличением массы первичного иона формируется большее количество вакансий и междоузельных дефектов на поверхности по сравнению с объемом кристалла. Для ионов с наименьшей массой наблюдается большее количество дефектов внедрения на поверхности, чем в объеме кристалла. Это указывает на то, что вероятность имплантации ионов в приповерхностную область увеличивается с уменьшением массы иона, что влияет на формирование спектров полного тока внедренных дефектов на поверхности кристаллов.

Таким образом, при разработке процессов создания p-n переходов, радиационно-стимулированной диффузии и имплантации, требуется учитывать не только температуру подложки, но также и энергию имплантации иона, зависящую от его массы.

## ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ ГОМООЛИГОНУКЛЕОТИДОВ

Шарипов Т.И.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, e-mail: sha-t@ya.ru*

Для создания миниатюрных электронных схем необходима эффективная технология создания нанопроводов. Широкие перспективы применения ДНК в нанoeлектронике обусловлены возможностью использования их в качестве нанопроводов [1]. Атомно-силовая микроскопия (АСМ) и сканирующая туннельная микроскопия (СТМ) являются одними из главных методов исследования свойств биомолекул на предмет их использования в микро- и нанoeлектронике [2, 3].

В работе [4] описывается разработка нового простого способа получения серебряных нанопроволок методом электрохимического восстановления связанных с ДНК ионов серебра. Описан метод создания ориентированных в одном направлении ДНК-фибрилл на поверхности кремния. Получены АСМ-изображения зафиксированных молекул ДНК и готовых нанопроволок.

Цель нашего исследования состояла в визуализации и определении электрической проводимости гомоолигонуклеотидов, которые представляют собой последовательности только одного вида нуклеотида: аденина ( $dA_{12}$ ) либо цитозина ( $dC_{12}$ ).

Для визуализации гомоолигонуклеотидов и оценки их осаждаемости на поверхности подложки мы использовали АСМ, для измерения вольтамперных характеристик применяли СТМ. Для исследования были использованы молекулы олигонуклеотидов с повторяющейся последовательностью, состоящие из 12 одинаковых звеньев.

### Список литературы:

1. Ryndyk D., Shapir E., Porath D., Calzolari A., Di Felice R., Cuniberti G. // ACS Nano, 2009, №3(7), P. 1651-1656.
2. Sharipov T., Garafutdinov R., Mishra A., Santer S., Shaikhitdinov R., Balapanov M., Bakhtizin R. // Eurasian Journal of Physics and Functional Materials, 2023, V. 7(4), P. 232-238.
3. Sharipov T.I., Sakhautdinov I.M., Talipov R.F., Garafutdinov R.R. // Journal of Nanoparticle Research, 2023, V. 25, 64.
4. Puchkova A.O., Sokolov P., Kasyanenko N.A. // J Nanopart Res, 2011, №13(9), P. 3633-3641.

## ФОТОПРОВОДИМОСТЬ ТОНКИХ ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ПОИАНИЛИНОВ.

Юмалин Т.Т., Салихов Р.Б.

*Уфимский университет науки и технологии,  
450076, Россия, г. Уфа, ул. Заки Валиди, дом 32, e-mail: timur-sibay@mail.ru.*

Изучены флуоресцентная спектроскопия и фотоэлектрические характеристики тонких пленок и сополимеров, основанных на полианилине. Цель исследования заключается в понимании взаимосвязи между составом и структурой полимеров полианилина, а также их оптическими и электрическими свойствами. Полученные данные показывают, что электрические свойства тонких пленок зависят от условий их изготовления и морфологии поверхности. Также отмечается, что фотопроводимость полианилинов может быть улучшена путем введения дополнительных молекулярных групп в полимерную матрицу. В целом, данное исследование раскрывает потенциал полианилинов как перспективных материалов для органической электроники и представляет возможности оптимизации их свойств для конкретных практических применений [1-2].

**Таблица 1.** Зависимость фоточувствительности полимеров от мощности облучения.

	Образец	Мощность излучения, Вт/см <sup>2</sup>			
		0.175	0.35	1.05	3.5
Фоточувствительность	P5	550	980	2230	8520
	P6	110	90	150	2990
	P7	200	370	630	3700
	P8	320	630	1080	12000
	P9	170	410	730	1330
	S6	1030	1910	3620	5680
	S7	400	720	1360	4550
	S8	4490	5830	10300	24600
	S9	5260	6790	15090	35700

### Список литературы:

1. Sadretdinova Z.R., Akhmetov A.R., Salikhov R.B., Mullagaliev I.N., Salikhov T.R. 1,2,3-Triazolylfullerene-based n-type semiconductor materials for organic field-effect transistors // Mendeleev Communications, 2023, V. 33(3), P. 320-322.
2. Latypova L.R., Andrianova A.N., Usmanova G.S., Salikhov R.B., Mustafin A.G. Influence of copolymer composition on the properties of soluble polyanilines // Polymer International, 2023, V. 72, P. 440-450.

## НАГРЕВАТЕЛИ НА ОСНОВЕ ПОЛИАРИЛЕНФТАЛИДА И ГРАФЕНА

Яхин А.Р.<sup>a</sup>, Юсупов А.Р.<sup>a</sup>, Карамов Д.Д.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Акмуллинский университет, Молодежная лаборатория «Прикладная физика и технологии наносенсорики», 450077, Россия,

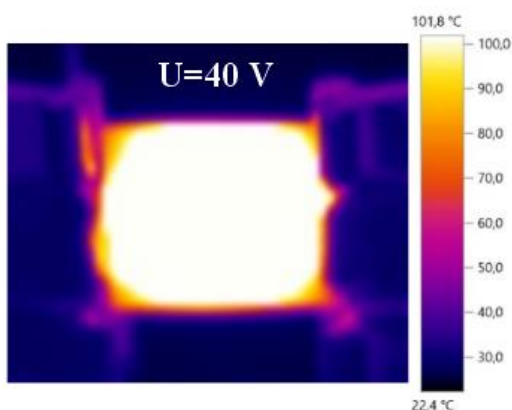
Уфа, ул. Октябрьской революции, 3-а, e-mail: archy.riv.845@gmail.com

<sup>b</sup> Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, 450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: karamov\_danfis@bk.ru

В настоящее время растет потребность в гибких, дешевых и эффективных устройствах нагрева для разных областей, таких как биомедицина, робототехника, устройства хранения энергии, пищевая промышленность и т.д. Реализация таких устройств становится возможной, благодаря сочетанию свойств полимерных материалов, обладающих необходимой гибкостью и устойчивостью к высоким температурам, и углеродных наноматериалов, обладающих высокой проводимостью и армирующими свойствами.

Целью настоящей работы является исследование теплогенерирующих свойств полимерного композита на основе термо- и хемостойкого аморфного полидифениленфталата и коммерческого технического графена (RG-S1, RG-P1).

В качестве основного метода получения тонких пленок полимерного

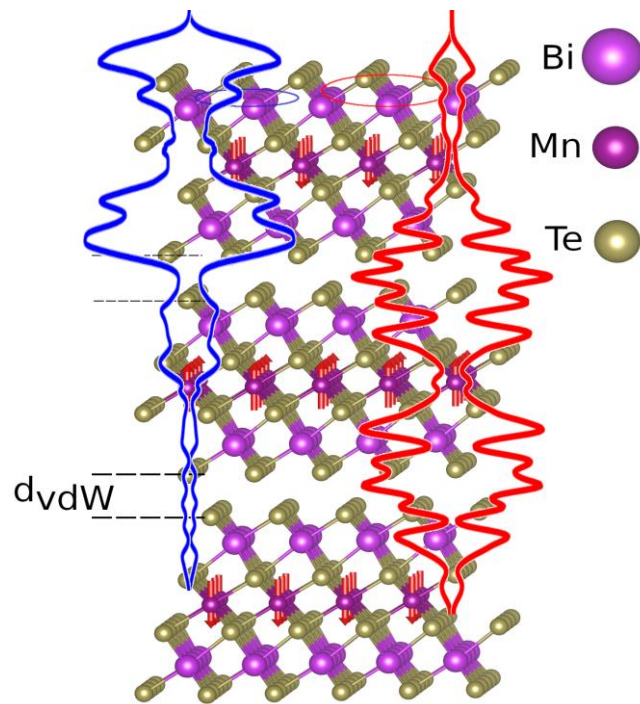


**Рис.1.** Термограмма полимерного композита на основе RG-P1.

композиата был выбран метод полива. На рис. 1 показана термограмма полученной экспериментальной структуры. Согласно расчетам, проведенным на данной структуре, мощность нагревателя составила ~3 Вт при сопротивлении пленки композита в 565 Ом. Эффективность преобразования электронного нагрева составила 0,018 Вт/°С.

В докладе будут представлены результаты работы и их обсуждение.

# Магнетизм и спинтроника



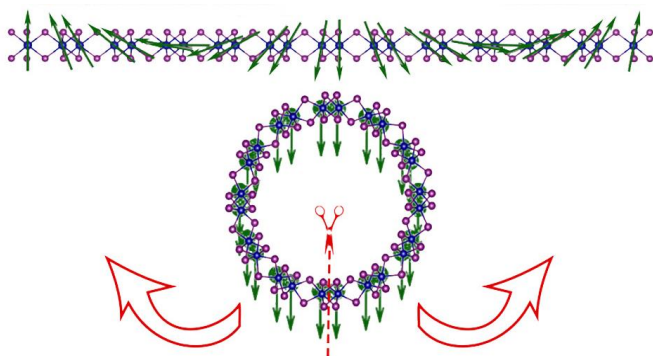
## INTERPLAY BETWEEN SPIN, ELECTRONIC AND MECHANICAL DEGREES OF FREEDOM IN THIN MAGNETIC FILMS AND VAN DER WAALS MATERIALS<sup>1</sup>

Pyatakov A.P.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> *Lomonosov Moscow State University, Leninskie gori, Msu, 119991, Moscow, Russia; e-mail: Pyatakov@physics.msu.ru*

<sup>b</sup> *MIREA - Russian Technological University, 119454, Moscow, Russia*

The beginning of 21-st century has witnessed the advent of new class 2D graphene-like materials with unusual electronic and spin properties [1,2]. Magnetic films and 2D magnets in particular are naturally prone to the mechanical deformation and



**Fig. 1.** An example of a curvature-induced effect: “plumb-line” spin configuration in a nanotube is equivalent to spin cycloid structure in a flat monolayer.

the giant strain-induced effects. Therefore 2D magnets can be considered as a new class of multiferroics with enhanced cross-correlation between various subsystems of crystal: mechanical, electric and magnetic ones.

In this report the spin flexoelectricity in  $\text{CrI}_3$  [3], ferrovalley-mediated magnetoelectric coupling in  $\text{VS}_2$  [2], flexomagnetic effect in vDW materials [4] will be considered.

### Reference list:

1. Huang B., Clark G., Navarro-Moratalla E. et al. Layer-dependent ferromagnetism in a van der Waals crystal down to the monolayer limit // *Nature*, 2017, V. 546, P. 270.
2. Xingen L., Pyatakov A.P., Ren W. Magnetoelectric coupling in multiferroic bilayer  $\text{Vs}_2$  // *Physical Review Letters*, 2020, V. 125, 247601.
3. Pyatakov A.P., Pyatakova Z.A. Multiferroics in two dimensions: The coupling of mechanical, magnetic and ferroelectric subsystems in van der waals materials // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.*, 2023, V. 587, 171255.
4. Lei Q., Sladek J., Sladek V., Kaminskiy A.S., Pyatakov A.P., Wei R. Curvature-induced magnetization in a  $\text{cri}_3$  bilayer: Flexomagnetic effect enhancement in van der waals antiferromagnets // *Physical Review B*, 2024, V. 109, 014410.

<sup>1</sup> The work is supported by Russian Ministry of Science and Education (Project No. 075-15-2022-1131).

## КВАЗИОДНОМЕРНЫЕ МАГНЕТИКИ НА ПРИМЕРЕ ФАЗ СОСТАВА $A_2B(SeO_3)_2Cl_2$

Астахов Н.В.<sup>a</sup>, Бердоносков П.С.<sup>a</sup>, Моськин А.В.<sup>a,b</sup>, Козлякова Е.С.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
Москва, Россия, 119991, e-mail: nickavit@yandex.ru

<sup>b</sup>Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»,  
Москва, Россия, 119049

В последнее время наблюдается повышенное внимание к веществам, которые обладают магнитными подсистемами пониженной размерности [1]. Благодаря экзотическому строению их кристаллической решетки, в таких материалах возникают корреляции ближнего порядка, с возможной реализацией состояния квантовой спиновой жидкости. Интерес в первую очередь фундаментальный, однако, есть предположения об их использовании в управляемых теплопроводах [2] и применении в квантовых компьютерах [3]. Примером таких соединений могут выступать фазы состава  $A_2B(SeO_3)_2Cl_2$  ( $A = Sr, Ba$ ;  $B = Co, Mn$ ) с реализующимися в них одномерными цепочками  $Me-O-Se-O-Me$ .

Целью данной работы является поиск и синтез фаз из семейства  $A_2B(SeO_3)_2Cl_2$  ( $A = Sr, Ba$ ;  $B = Co, Mn$ ) а также изучение их физических свойств.

В результате работы получены оптимальные условия для получения образцов в зависимости от состава. На температурных зависимостях магнитной восприимчивости в данных образцах наблюдаются широкие максимумы, связанные с антиферромагнитными 1D корреляциями.  $Sr_2Mn(SeO_3)_2Cl_2$  и  $Sr_2Co(SeO_3)_2Cl_2$  претерпевают антиферромагнитное упорядочение при температуре  $T_N=3.01$  К и  $T_N=2.81$  К, в то время как фазы с барьером не упорядочились вплоть до 2 К. В данной работе проводится сравнение магнитных параметров указанных фаз.

### Список литературы:

1. Berdonosov P.S., Kuznetsova E.S., Dolgikh V.A. // Crystals 2018, V. 8(4), P.159.
2. Hess C. // Eur. Phys. J. Spec. Top. 2007, V. 151, P. 73–83.
3. Mishra, Shantanu et al. // Nature 2021, V. 598, 7880. P. 287-292.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ ОКСИДОВ ПЕРОВСКИТНОГО ТИПА $Ba_{0.2}Sr_{0.2}Ca_{0.2}La_{0.2}Na_{0.2}CoO_3$ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННОГО СПИНОВОГО РЕЗОНАНСА<sup>1</sup>

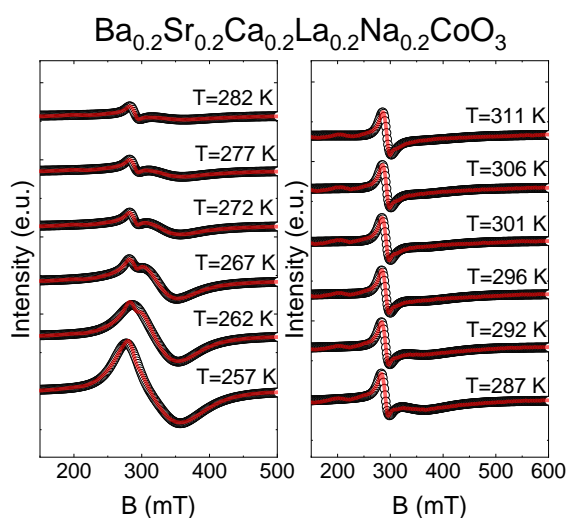
Рейес Х.Д.<sup>a</sup>, Яцык И.В.<sup>b</sup>, Еремина Р.М.<sup>b</sup>, Маити Т.<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Казанский (приволжский) федеральный университет,  
Институт физики, Казань, Россия

<sup>b</sup>Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского  
ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

<sup>c</sup>Department of Materials Science and Engineering, Indian Institute of Technology  
Kanpur, Kanpur 208016, UP, India, e-mail: juan043david@gmail.com

Лантан кобальтовый перовскит перспективен для твердо оксидного топливного элемента и является привлекательным материалом благодаря своей хорошей окислительной способности, термической стабильности, сверхпроводимости и исключительной каталитической активности [1].



**Рис. 1.** Эволюция спектров электронного спинового резонанса от температуры (от 176 до 320 К) для  $Ba_{0.2}Sr_{0.2}Ca_{0.2}La_{0.2}Na_{0.2}CoO_3$ . Круги – экспериментальные данные, сплошная линия – аппроксимация.

сти и исключительной каталитической активности [1].

Спектры электронного спинового резонанса измерялись на спектрометре EMX/plus (Bruker) на частоте 9.4 ГГц с азотным продувом и температурным контроллером RS 232 (Bruker) в диапазоне температур от 100 до 340 К и гелевый продув в температурном интервале от 5 К до 120 К. В соответствии с данными, приведенными на Рис. 1, можно определить температуру фазового перехода 254 К.

### Список литературы:

1. Dhakar S., Mukhopadhyay S., Thotiyil M.O., Sharma S. // Journal of Colloid and Interface Science, 2024, V. 654, Part A, P. 688-697.

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-42-02014.

## **СПИН-ПОЛЯРИЗОВАННЫЕ ИСТОЧНИКИ И ДЕТЕКТОРЫ ЭЛЕКТРОНОВ В ИССЛЕДОВАНИЯХ РЕЗОНАНСНОГО РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ<sup>1</sup>**

Голяшов В.А.<sup>а</sup>, Кустов Д.А.<sup>а</sup>, Степанов С.А.<sup>а</sup>, Пшеничнюк С.А.<sup>б</sup>,  
Асфандиаров Н.Л.<sup>б</sup>, Рахмеев Р.Г.<sup>б</sup>, Терещенко О.Е.<sup>а</sup>

<sup>а</sup>*Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, 630090,  
Россия, Новосибирск, Проспект ак. Лаврентьева, 13, e-mail: teresh@isp.nsc.ru*

<sup>б</sup>*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151*

В докладе обсуждаются созданные нами новые источники спин поляризованных электронов и спин-детекторы, а также их интегрирование в метод спектроскопии диссоциативного захвата электронов, исходя из необходимых значений параметров электронного пучка, включающих ток и полуширину энергетического распределения электронов, диапазон энергий электронов, в котором наблюдается резонансное рассеяние и диссоциативный захват, степень поляризации пучка и конструктивные особенности источника медленных электронов. Обсуждается эффект оптической накачки (ориентации) атомов/молекул, что, совместно с увеличением степени спиновой поляризации электронов в зондирующем пучке, является необходимым для повышения асимметрии сигнала, измеряемого для разных энантиомеров при различной поляризации электронов. Основной задачей ставится исследование взаимодействия спин-поляризованных электронов с хиральными молекулами, что позволит осуществить экспериментальную проверку гипотезы Вестера-Ульбрихта о происхождении биологической гомохиральности. Помимо данного основополагающего вопроса, ожидаемые результаты эксперимента важны для перспективных направлений спинтроники, а также – для установления молекулярных механизмов различного биологического действия энантиомеров фармацевтических препаратов.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 22-12-20024.

## ИОНЫ $\text{Co}^{3+}$ СО СПИНОМ $S=1$

### В МАГНИТНЫХ И ПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВАХ $\text{Ba}_2\text{CoNbO}_6$ <sup>1</sup>

Еремина Р.М.<sup>a</sup>, Попов Д.В.<sup>a</sup>, Яцык И.В.<sup>a</sup>, Фазлижанова Д.И.<sup>b</sup>, Батулин Р.Г.<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского  
ФИЦ КазНЦ РАН, 420029, Россия, Казань, Сибирский тракт 10/7,  
e-mail: REremina@yandex.ru

<sup>b</sup>Институт науки и технологий Сколково, 121205, Россия, Москва,  
Большой бульвар 30, e-mail: dina.fazlik@gmail.com

<sup>c</sup>Институт физики, Казанский Федеральный Университет, 420008, Россия,  
г. Казань, ул. Кремлевская 18, e-mail: tokatak@yandex.ru

В последнее время активно изучаются магнитные свойства двойных перовскитов  $(\text{Sr},\text{Ba})_2\text{MeNbO}_6$  ( $\text{Me} = \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}$ ), которые находят применение в качестве катализаторов и термоэлектриков. Нами проведены изучения магнитных и транспортных свойств двойных перовскитов с кобальтом и ниобием, которые представляют интерес благодаря способности ионов  $\text{Co}$  не только иметь разную валентность, но и находиться в разных спиновых состояниях. Ионы  $\text{Co}^{3+}$  с электронной конфигурацией  $3d^6$  демонстрируют три различных спиновых состояния: низкий спин  $S = 0$ , промежуточный спин  $S = 1$  и высокий спин  $S = 2$ . Проведенные нами вычисления методом DFT показывают возможное присутствие ионов  $\text{Co}$  с низким ( $S=0$ ) спином в  $\text{BaCo}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}\text{O}_3$  и промежуточным спином ( $S=1$ ) в  $\text{Ba}_2\text{CoNbO}_6$ . Из анализа экспериментальных данных по намагниченности и удельной теплоемкости в синтезированных методом цитратного пиролиза  $\text{Ba}_2\text{CoNbO}_6$  установлено, что температура перехода в состояние спинового стекла составляет  $T_{\text{SG}} = 30$  К. Эффективный магнитный момент равен  $4,29\mu_B$ , который согласуется с теоретическим в предположении, что ионы  $\text{Co}^{3+}$  имеют спин  $S=1$ ,  $g=3,5$  и составляют 75% от общего числа ионов кобальта в образце. Структурное фазовое расслоение в соотношении 3:1 подтверждается аппроксимацией рентгеноструктурных данных. Из магнитного вклада в теплоемкость оценены параметры кристаллического поля  $D=5,5\text{K}$  и  $E=2,5\text{K}$ .

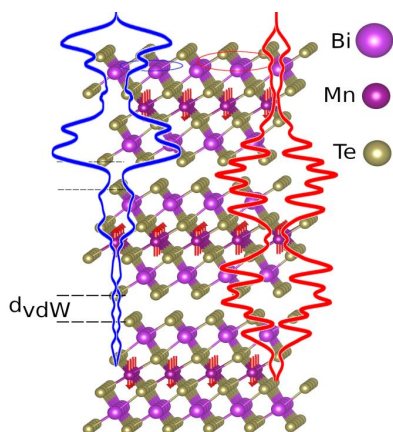
<sup>1</sup> Работа выполнена в рамках гранта РФФ 22-42-02014.

**ПОВЕДЕНИЕ СОСТОЯНИЙ ДИРАКА В КРИСТАЛЛАХ  
MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>(Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>)<sub>m</sub> ПРИ ИЗМЕНЕНИИ ОБМЕННОГО,  
ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО И СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ПОЛЕЙ<sup>1</sup>**

Зайцев Н.Л.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: nza@ya.ru*

В рамках метода теории функционала плотности, в работе исследуется отклик топологических поверхностных состояний Дирака (ТПС) на изменение спин-орбитального, внешнего электростатического и обменного полей (за счет изменения геометрической структуры кристалла). Основное внимание уделяется анализу состояний, которые образуют нижний конус Дирака, и выявлению общих черт поведения ТПС при отклике на воздействия этих полей. Проводится анализ пространственной локализации ТПС и их спиновой структуры.



**Рис. 1.** Структура поверхности MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>.

Анализ показывает, что в зависимости от параметров рассматриваемых полей, нижний конус образует либо состояние, локализованное в первом семислойнике (SL) MnBi<sub>2</sub>Te<sub>4</sub>, либо состояние пространственно распределенное по двум поверхностным SL (рис. 1). Усиление спин-орбитального поля смещает состояние распределенное по двум SL выше по энергии, а ослабление, наоборот поднимает состояние локализованной в первом SL.

Подобным образом, взаимное расположение этих состояний зависит от параметров рассмотренных полей [1].

**Список литературы:**

1. Шикин А.М., Зайцев Н.Л., Тарасов А.В., Маркова Т.П., Глазкова Д.А., Естюнин Д.А., Климовских И.И. Электронная и спиновая структура топологических поверхностных состояний MnBi<sub>4</sub>Te<sub>7</sub> и MnBi<sub>6</sub>Te<sub>10</sub> и их модификация приложенным электрическим полем // Письма в ЖЭТФ, 2022, Т. 116, № 8, С. 544–555.

<sup>1</sup> Работа финансировалась за счет средств гранта Санкт-Петербургского Государственного Университета № 95442847.

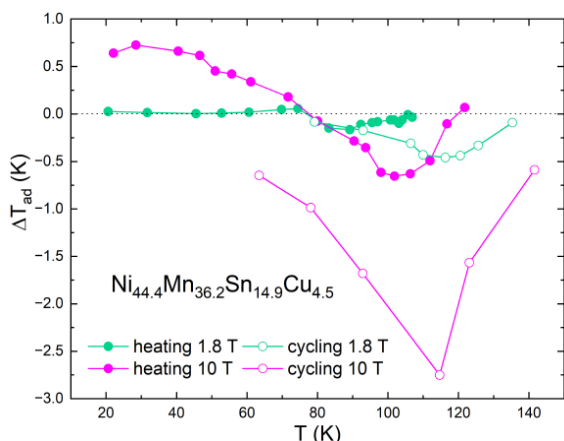
## ОСОБЕННОСТИ ИССЛЕДОВАНИЯ ОБРАТНОГО МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В СИЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ<sup>1</sup>

Каманцев А.П.<sup>a</sup>, Кошкидько Ю.С.<sup>a</sup>, Мусабилов И.И.<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН,  
125009, Россия, Москва, ул. Моховая 11/7, e-mail: kaman4@gmail.com

<sup>b</sup>Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, 450001,  
Россия, Уфа, ул. Степана Халтурина 39, e-mail: irektmusabirov@imsp.ru

Как прямой, так и обратный магнитокалорический эффект (МКЭ) могут быть использованы для магнитного охлаждения, однако использование обратного МКЭ – наиболее предпочтительно, так как рабочее тело при этом будет напрямую контактировать с охлаждаемой областью. Такая схема позволит быстро охлаждать область, находящуюся в магнитном поле, например, область сверхпроводящего магнита и окружающего его сжиженного газа (He или N<sub>2</sub>), что значительно упростит конструкцию магнитного холодильника.



**Рис. 1.** Температурные зависимости МКЭ в сплаве Гейслера  $\text{Ni}_{44.4}\text{Mn}_{36.2}\text{Sn}_{14.9}\text{Cu}_{4.5}$ , измеренные в магнитных полях 1,8 Тл (зеленые кривые) и 10 Тл (фиолетовые кривые) в двух разных режимах: сплошные кружки — при последовательном нагреве образец; пустые кружки — после предварительного охлаждения до 4,2 К и последующего нагрева до температуры измерения.

В представленной работе изучались сплавы Гейслера с обратным МКЭ:  $\text{Ni}_{47}\text{Mn}_{40}\text{Sn}_{12.5}\text{Cu}_{0.5}$  и  $\text{Ni}_{44.4}\text{Mn}_{36.2}\text{Sn}_{14.9}\text{Cu}_{4.5}$  (рис 1). Максимальное значение обратного МКЭ в области ФП 1-го рода в поле 1.8 Тл составляет  $\Delta T_{\text{ad}} = -0,5$  К при  $T_0 = 117$  К. При увеличении магнитного поля до 10 Тл обратный МКЭ достигает значения  $\Delta T_{\text{ad}} = -2,7$  К при  $T_0 = 117$  К. В режиме нагрева при 20–60 К в магнитном поле 10 Тл наблюдается прямой МКЭ в ферромагнитной мартенситной фазе, достигающий значения  $\Delta T_{\text{ad}} = 0.7$  К.

<sup>1</sup> Работа выполнена в рамках госзадания ИРЭ им. В.А.Котельникова РАН

**ПРИГРАНИЧНЫЕ И ДВИЖУЩИЕСЯ СОЛИТОНЫ  
В ПОЛУБЕСКОНЕЧНОМ ФЕРРОМАГНЕТИКЕ  
С АНИЗОТРОПИЕЙ ТИПА “ЛЕГКАЯ ОСЬ”<sup>1</sup>**

Киселев В.В.

*Институт физики металлов УрО РАН имени М.Н. Михеева, 620108, Россия,  
г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18, e-mail: kiseliev@imp.uran.ru*

В данной работе предложена модификация метода обратной задачи рассеяния [1, 2] для описания солитонов и диспергирующих волн в рамках модели Ландау–Лифшица полубесконечного ферромагнетика с анизотропией типа “легкая ось”. Рассмотрены смешанные краевые условия, отвечающие частичному закреплению спинов на границе образца. При таких краевых условиях получено два типа солитонов: приграничные солитоны, локализованные вблизи границы образца, и движущиеся солитоны, упруго отражающиеся от границы.

Выявлена возможность управления числом приграничных солитонов посредством изменения степени закрепления поверхностных спинов. Показано, что краевые солитоны обладают дискретным набором собственных частот, а намагниченность на границе образце претерпевает регулярные модуляции. Детально исследовано отражение прецессирующих движущихся солитонов от границы образца. Измерение сдвига фазы, приобретаемого солитонами после их отражений от границы, можно использовать для диагностики степени закрепления поверхностных спинов.

Получены дополнительные законы сохранения, которые обеспечивают локализацию солитонов вблизи поверхности образца или их отражение от таковой.

**Список литературы:**

1. Борисов А.Б., Киселев В.В. Квазиодномерные магнитные солитоны // Физматлит, Москва, 2014.
2. Фаддеев Л.Д., Тахтаджян Л.А. Гамильтонов подход в теории солитонов // Наука, Москва, 1986.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки России (тема “Квант”, № 122021000038-7)

## **ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СОЛИТОНОВ С ГРАНИЦЕЙ КИРАЛЬНОГО ФЕРРОМАГНЕТИКА С ЛЕГКОПЛОСКОСТНОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ<sup>1</sup>**

Киселев В.В., Расковалов А.А.

*Институт физики металлов УрО РАН имени М.Н. Михеева, 620108, Россия,  
г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18, e-mail: raskovalov@imp.uran.ru*

В данной работе предложена модификация метода обратной задачи рассеяния [1, 2] для описания солитонов и диспергирующих волн в рамках модели Ландау–Лифшица полубесконечного ферромагнетика с анизотропией типа “легкая плоскость” [3]. Под “полубесконечным” мы понимаем ферромагнетик, бесконечно протяженный в одну сторону, в то время, как на другой стороне он имеет границу. Показано, что модель легкоплоскостного ферромагнетика изоморфна модели полубесконечного ферромагнетика без центра инверсии с геликоидальным основным состоянием. Получены аналитические выражения, связывающие решения для солитонов и волн в обеих моделях. На их основе выявлены особенности взаимодействия солитонов с границей кирального ферромагнетика.

Рассмотрены смешанные краевые условия, предельными случаями которых являются свободные и полностью закрепленные спины на границе образца. Детально проанализировано отражение от границы образца двух возможных типов солитонов – а именно, простейшего солитона – кинка, и пульсирующего связанного состояния двух кинков с противоположными направлениями закрутки – бризера.

### **Список литературы:**

1. Борисов А.Б., Киселев В.В. Квазиодномерные магнитные солитоны // Физматлит, Москва, 2014.
2. Фаддеев Л.Д., Тахтаджян Л.А. Гамильтонов подход в теории солитонов // Наука, Москва, 1986.
3. Kiselev V.V., Raskovalov A.A. // Chaos, Solitons & Fractals (2024) [готовится к печати].

---

<sup>1</sup> Работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки России (тема “Квант”, № 122021000038-7)

**МАГНИТНЫЕ СУСПЕНЗИИ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ,  
ПОЛУЧЕННЫХ ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ:  
ОТ МЕХАНОХИМИИ ДО БИОПРИЛОЖЕНИЙ<sup>1</sup>**

Курляндская Г.В., Бурбан Е.А., Юшков А.А., Свалов А.В.

*ИЕНиМ, Уральский федеральный университет,  
620002, Россия, Екатеринбург, Мира, 19, e-mail: galinakurlyandskaya@urfu.ru*

Магнитные наночастицы (МНЧ), синтезированные электрофизическими методами в виде больших партий [1], позволяют проводить сравнительные исследования стабилизированных суспензий, полученных различными физико-химическими методами, но на основе одной партии МНЧ. В настоящей работе электростатически стабилизированные водные суспензии МНЧ магнетита или чистого железа были получены на основе партий МНЧ, синтезированных методами электрического взрыва проволоки или лазерного испарения мишени [1] как с использованием стандартных режимов ультразвуковой обработки, так и методами механохимии с применением диспергирования в шаровой мельнице. Известно, что, в отличие от небольших молекул, свойства которых идентичны [2], МНЧ даже в рамках одной партии демонстрируют заметную вариабельность, особенно в случае ансамбля МНЧ с большим разбросом по размерам. По-видимому, именно вариабельность физико-химических свойств ансамбля и позволяет методом механохимического синтеза получить электростатически стабилизированную с помощью цитрата натрия водную суспензию МНЧ Fe, имеющую дзета-потенциал около 50 мВ. По данным электронной микроскопии и рентгено-фазового анализа в исходном состоянии МНЧ  $\alpha$ -Fe были не агломерированы и имели сферическую форму при среднем размере около 80 нм.

**Список литературы:**

1. Kurlyandskaya G.V., Safronov A.P., Terzian T.V., Volodina N.S., Beketov I.V., Lezama L., Marcano Prieto L. Fe<sub>45</sub>Ni<sub>55</sub> magnetic nanoparticles obtained by electric explosion of wire for the development of functional composites // IEEE Magn. Lett., 2015, 8, 3800104.
2. Grossman J.H., McNeil S.E. Nanotechnology in cancer medicine // Physics Today, 2012, 65(8), 38-42.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, грант № 23-29-00025.

## СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ТЕОРИИ СПИНОВОЙ ХИМИИ

Салихов К.М.

*Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского,  
420029, Россия, Казань, Сибирский Тракт, 10/7, e-mail: kevsalikhov@mail.ru*

100 лет прошло после открытия спинового момента электрона и 50-лет тому назад было экспериментально наблюждено и дано теоретическое описание влияния магнитного поля на кинетику радикальных реакций в конденсированных средах. Вскоре был открыт и магнитный изотопный эффект. Это привело к зарождению и развитию новой научной дисциплины-спиновой химии.

В этой лекции будут сформулированы основополагающие утверждения, которые составляют базис для описания и развития этой научной дисциплины.

Фактически, развитие спиновой химии свидетельствует о сдвиге парадигмы химической кинетики. В химическую кинетику были введены новые "действующие лица" - промежуточные пары парамагнитных частиц (чаще всего радикалов) в "клетке", в которых движение электронных спинов рассматривается в явном виде. Принципиальное значение имеет изменение электронной мультиплетности, например, синглет-триплетные переходы радикальных пар в "клетке", индуцированные магнитными взаимодействиями электронов пар парамагнитных частиц: спин-орбитальная связь, сверхтонкое взаимодействие с магнитными ядрами, взаимодействие электронов с внешними магнитными полями.

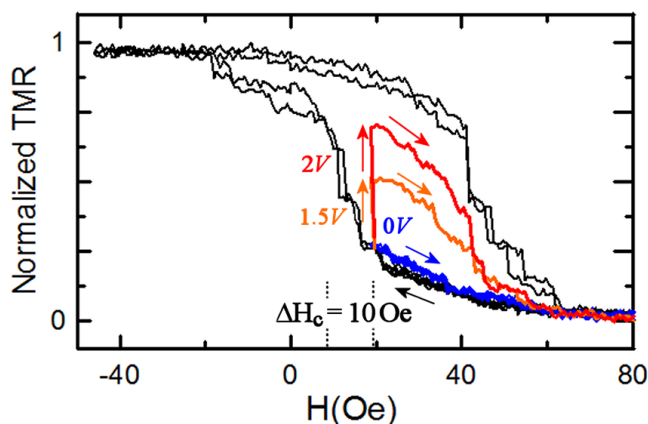
В лекции кратко обсуждены проблемы теории спиновой химии. Приведены перспективные примеры применения результатов спиновой химии.

## МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ОБМЕННЫЙ ЭФФЕКТ В ТУННЕЛЬНЫХ МАГНИТОРЕЗИСТИВНЫХ КОНТАКТАХ<sup>1</sup>

Сапожников М.В., Пашенькин И.Ю., Гусев Н.С.

*Институт физики микроструктур РАН, Нижний Новгород,  
e-mail: msap@ipmras.ru*

В рамках данной работы была отработана технология изготовления ТМР-контактов CoFeB/MgO/CoFeB, а также проведены исследования возможности управления межслоевым обменным взаимодействием за счет приложения электрического напряжения. Эта система демонстрирует эффект гигантского туннельного магнетосопротивления 200% и является перспективной для создания элементов энергонезависимой магниторезистивной памяти с произвольным доступом (МРАМ). Магнитотранспортные измерения при различных напряжениях показали, что увеличение приложенного напряжения с 50 мВ до 1.25 В на приводит к сдвигу кривой намагничивания свободного слоя по магнитному полю на величину до 10 Ое.



**Рис. 1.** Изменение сопротивления ТМР контактам после подачи импульса напряжения длительностью 100 нс.

при что на 2 – 3 порядка ниже токов, необходимых для переключения ячейки МРАМ за счет spin-transfer torque-эффекта. Наблюдаемый эффект связан с изменением обменного взаимодействия между магнитными слоями через диэлектрический барьер при приложении сильного электрического поля к барьеру.

При приложении импульса напряжения длительностью 100 нс наблюдается изменение сопротивления контакта на 50 % (Рис. 1), что свидетельствует о соответствующем изменении магнитного состояния свободного слоя контакта. При этом плотность тока, протекающего через контакт составляет всего  $10^3$  А/см<sup>2</sup>,

<sup>1</sup> Работа выполнена в рамках государственного задания ИФМ РАН (проект FFUF-2024-0021)

## **ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ И МАГНИТОКАЛОРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В ВЫСОКОЭНТРОПИЙНЫХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ СПЛАВАХ<sup>1</sup>**

Свалов А.В., Незнахин Д.С., Андреев С.В., Архипов А.В., Курляндская Г.В.

*Институт естественных наук и математики, УрФУ, 620002, Россия,  
Екатеринбург, ул. Мира, 19, e-mail: andrey.svalov@urfu.ru*

Сравнительно недавно было показано, что концепция высокоэнтропийных сплавов имеет большой потенциал для разработки новых эффективных магнитокалорических материалов на основе редкоземельных элементов [1]. Этому способствуют как присущее редким землям большое изменение магнитной части энтропии, так и наличие двух последовательных фазовых переходов при уменьшении температуры: парамагнетик – антиферромагнетик и антиферромагнетик – ферромагнетик, следствием чего является увеличение относительной охлаждающей мощности.

Рабочий материал для магнитных холодильников в виде быстрозакаленных лент обладает рядом преимуществ, таких как высокая величина отношения площади поверхности к объему, что способствует эффективному теплообмену, возможность варьировать эффективную магнитную анизотропию за счет анизотропии формы и локальной магнитной анизотропии, механическая гибкость, расширяющая разнообразие форм рабочего тела.

В данной работе показано, что изменение условий приготовления влияет на особенности микроструктуры быстрозакаленных лент, их магнитные и магнитокалорические свойства. В частности, изменяется величина магнитного поля, достаточного для подавления фазового перехода парамагнетик-антиферромагнетик, а также величина относительной охлаждающей мощности в температурном интервале вблизи данного перехода.

### **Список литературы:**

1. Yuan Y., Wu Y., Tong X., Zhang H., Wang H., Liu X.J., Ma L., Suo H.L., Lu Z.P. Rare-earth high-entropy alloys with giant magnetocaloric effect // Acta Mater., 2017, 125, P.481-489.

---

<sup>1</sup> Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-29-00199, <https://rscf.ru/project/24-29-00199/>.

## **МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ СКИРМИОНОВ В ФЕРРИМАГНИТНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ<sup>1</sup>**

Телегин А.В., Баталов С.В., Теплов В.С., Бессонов В.Д.

*Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, 620108, Россия,  
г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской 18, e-mail: telegin@imp.uran.ru.*

Фундаментальные исследования на стыке топологического магнетизма и спинтроники открывают новые технологические возможности для создания сверхбыстрых наноразмерных устройств передачи и хранения данных на основе многослойных наноструктур с нарушенной симметрией инверсии, в которых за счет взаимодействия Дзялошинского-Мории (ВДМ) могут возникать локализованные магнитные вихри (скирмионы). Однако пока не до конца ясны механизмы передвижения и стабилизации скирмионов в таких структурах, нет четкого понимания и какие материалы могут быть наиболее оптимальными.

В работе проведено микромагнитное моделирование киральных спиновых текстур в тонкопленочных ферро-(ФМ) и ферримагнитных (ФИМ) системах. Исследовано влияние межслоевой косвенной обменной связи в многослойных средах на топологическую структуру и поведение киральных спиновых текстур. Определены условия стабилизации скирмионов, проведена оценка динамики спиновых текстур в зависимости от намагниченности, параметра затухания, магнитной анизотропии, величины и знака ВДМ под воздействием спинового тока. Показано, что в ФИМ скирмион под действием тока движется может двигаться практически прямолинейно, по сравнению с ФМ. Скорость движения скирмиона в случае ФИМ почти на порядок выше, чем в случае ФМ, что связано со стремлением суммарного топологического заряда скирмиона к нулю по мере приближения ФИМ к состоянию компенсации.

Показана перспективность ферримагнитных структур по сравнению с ферромагнитными для экспериментального обнаружения и изучения магнитных скирмионов.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 21-72-20160 (<https://rscf.ru/en/project/21-72-20160>)

## ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ОБЪЕКТЫ В НАНОРАЗМЕРНОЙ ПЛЕНКЕ<sup>1</sup>

Филиппова В.В., Гареева З.В.

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: mukhamadeeva.vika@mail.ru.

В последние десятилетия наблюдается рост работ на тему, связанную с материалами и наноструктурами, которые могут стать основой для новых электронных устройств [1].

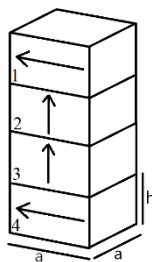


Рис. 1. Схематичный вид модельного объекта.

В данной работе рассматривалась ферромагнитная структура с чередующимися слоями с различным типом магнитной анизотропии вида «легкая плоскость»-«легкая ось». Параметры материала:  $M_i=50$  кА/м,  $A_{1,4} = 2.9 \cdot 10^{-12}$  Дж/м,  $A_{2,3} = 4 \cdot 10^{-12}$  Дж/м,  $K_{1,4} = -7 \cdot 10^5$  Дж/м<sup>3</sup>,  $K_2 = 2 \cdot 10^5$  Дж/м<sup>3</sup>,  $K_3 = 2 \cdot 10^3$  Дж/м<sup>3</sup>,  $J_{12,34} = 3.5 \cdot 10^{-12}$  Дж/м,  $J_{23} = 0.2 \cdot 10^{-12}$  Дж/м,  $a = 200$  нм,  $h = 24$  нм (для одного слоя) или 96 нм (для всей пленки), где  $A_i$  – константа неоднородного обменного взаимодействия;  $K_i$  – константа магнитной анизотропии.

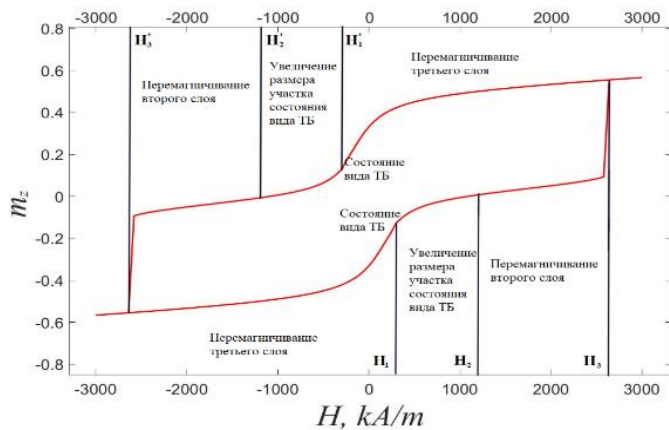


Рис. 2. График возможных состояний в системе.

Рассмотрены процессы намагничивания и перемагничивания выбранной структуры (Рис. 2), определены области существования точек Блоха, изучено влияние изменения констант анизотропии вида «легкая ось». Исследованы особенности магнитных структур, возникающих при различных значениях констант анизотропии вида «легкая плоскость» в ходе процессов намагничивания и размагничивания.

### Список литературы:

1. Мелтов К.Л. Топологическая память на многосвязных планарных магнитных наноэлементах // Письма в ЖЭТФ, 2023, Т. 118, вып. 2, С. 95–101.

<sup>1</sup> Работа поддержана грантом РФФ № 23 – 22 -00225.

**ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ И СПИНОВОЙ СТРУКТУРЫ  
МАГНИТНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ  
И ИХ ВЗАИМОСВЯЗЬ  
С ТОПОЛОГИЧЕСКИМИ ФАЗОВЫМИ ПЕРЕХОДАМИ<sup>1</sup>**

Шикин А.М.<sup>a</sup>, Зайцев Н.Л.<sup>b</sup>, Естюнин Д.А.<sup>a</sup>, Естюнина Т.П.<sup>a</sup>, Тарасов А.В.<sup>a</sup>,  
Кох К.А.<sup>c</sup>, Голяшов В.А.<sup>c</sup>, Терещенко О.Е.<sup>c</sup>

<sup>a</sup>*СПбГУ, Россия, 199034, г. Санкт-Петербург, Новый Петергоф,  
Университетский пр., д. 1, e-mail: ashikin@inbox.ru.*

<sup>b</sup>*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
Россия, 450075, г. Уфа, пр. Октября, д.151.*

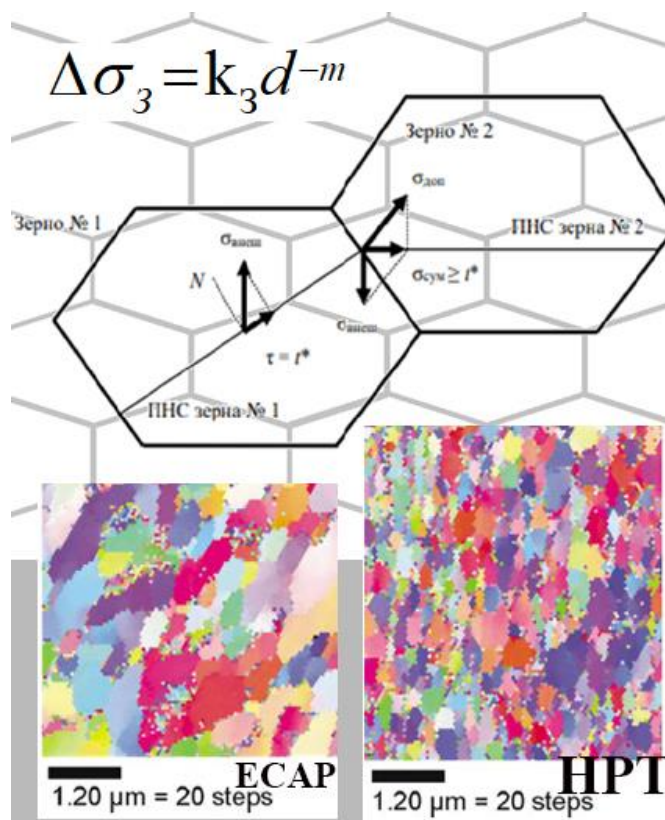
<sup>c</sup>*Институт физики полупроводников им. Ржанова,  
Россия, 630090, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, д. 13.*

В докладе представлены и проанализированы особенности электронной структуры различных топологических изоляторов, а также возможности топологических фазовых переходов, реализуемых в данных системах при различных воздействиях. Проанализированы принципы формирования электронной структуры топологических изоляторов и соответствующих топологических поверхностных состояний, а также влияния магнитных примесей на электронную структуру. Особое внимание уделено анализу особенностей электронной структуры собственного магнитно-упорядоченного антиферромагнитного топологического изолятора  $\text{MnV}_2\text{Te}_4$  и соединений на его основе. Проанализирована возможность топологических фазовых переходов в системах с замещением атомов магнитного металла Mn на атомы Ge при различных концентрациях, а также при изменении эффективной величины спин-орбитального взаимодействия и межплоскостных расстояний. Также анализируется возможность формирования состояний Вейлевского и Дираковского полуметаллов и соответствующих топологических фазовых переходов из состояния топологического изолятора в состояние тривиального изолятора через фазы Вейлевского и Дираковского полуметаллов.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, проект № 23-12-00016

# Физика наноструктурных материалов



## **ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ВО ВРЕМЯ ДЕФОРМАЦИИ В ЦИНКОВОМ СПЛАВЕ ZN-1FE-1MG <sup>1</sup>**

Абдрахманова Э.Д.<sup>a</sup>, Хафизова Э.Д.<sup>a,b</sup>, Поленок М.В.<sup>a,b</sup>, Ситдииков В.Д.<sup>b,c</sup>

<sup>a</sup> *ФГБОУ ВО Уфимский университет науки и технологий,  
450076, Россия, Уфа, ул. Заки Валиди 32, e-mail: elmira.abdr2019@mail.ru*

<sup>b</sup> *Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: conf-itcr@anrb.ru*

<sup>c</sup> *ООО «РН-БашНИПИнефть», 450103, Россия, Уфа, ул. Сочинская, 12*

В настоящий момент активно ведется разработка новых материалов для медицинских применений. Одним из актуальных направлений являются биодegradуемые материалы, способные растворяться в организме без вреда для человека. Цинковые сплавы рассматриваются как перспективный материал благодаря своей биосовместимости и подходящей скорости коррозии, однако механические свойства цинка и цинковых сплавов низкие, поэтому для повышения свойств применяется деформационная обработка. В данной работе рассмотрены фазовые превращения, протекающие в сплаве Zn-1Fe-1Mg в процессе интенсивной пластической деформации кручением (ИПДК).

ИПДК проводилось при комнатной температуре, количество оборотов 1, 5 и 10, с приложенным давлением 6 ГПа, скорость деформации 1 об/мин. ИПДК приводит к росту предела прочности до 415 МПа, увеличению твердости до значения 144 НВ и повышению пластичности (до 82 %). Для объяснения причин повышения механических свойств данного сплава, проведены комплексные испытания методами микроскопии и рентгеноструктурного анализа. Установлено, что в результате ИПДК обработки в основных фазах (Zn, Mg<sub>2</sub>Zn<sub>11</sub>) происходит измельчение зеренной структуры, повышение плотности внесенных дефектов и формирование развитой кристаллографической текстуры состоящей из базисных, пирамидальных, призматических и двойниковых компонент текстуры.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 23-29-00667.

## СТРУКТУРА И СВОЙСТВА СПЛАВА СИСТЕМЫ Mg-Zn-Zr ПОСЛЕ РКУП И УЛЬТРАЗВУКА<sup>1</sup>

Аксенов Д.А.<sup>a</sup>, Шишкунова М.А.<sup>a,b</sup>, Назаров А.А.<sup>c</sup>,  
Асфандияров Р.Н.<sup>a,b</sup>, Сементеева Ю.Р.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: aksyonovda@mail.ru.

<sup>b</sup>Уфимский университет науки и технологий,  
450076, Россия, Уфа, ул. З. Валиди 32.

<sup>c</sup>Институт проблем сверхпластичности металлов РАН,  
450001, Россия, Уфа, ул. Степана Халтурина 39.

Работа направлена на решение проблемы повышения прочности и коррозионной стойкости магниевых сплавов медицинского применения. Установлено влияние равноканального углового прессования при различных режимах (1 проход при 400 °С и 2 проход при 170 °С) на основные структурные характеристики, прочность и коррозионную стойкость сплава Mg-8,6Zn-1,2Zr. Показано, что после РКУП формируется структура смешанного типа с рекристаллизованными зернами размером ~5 мкм, и крупными зернами, достигающими 20 мкм в поперечном сечении. РКУП при 400 °С за 1 цикл позволяет достичь предела прочности на разрыв 330 МПа. Второй проход РКУП при 170 °С не ведет к увеличению прочности материала. Скорость коррозии повышается с 8 мм/год до 10 и 12 мм/год для РКУП при 400 и 170 °С соответственно.

Объемная ультразвуковая обработка в течении 120 секунд при амплитуде 10 мкм ведет к уменьшению скорости коррозии для состояния после РКУП при 400 °С до исходного значения 8 мм/год. Однако наблюдается снижение предела прочности до 320 МПа. Для состояния после 2 прохода при 170 °С скорость коррозии, наоборот, увеличивается до 16 мм/год, а предел прочности снижается до 305 МПа.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 22-79-10325.

## **ПОДХОДЫ К ПОВЫШЕНИЮ СОПРОТИВЛЕНИЯ УСТАЛОСТИ МЕДИЦИНСКИХ ИМПЛАНТАТОВ ИЗ УМЗ ТИТАНА НА ОСНОВЕ БЕЗАБРАЗИВНОЙ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ ФИНИШНОЙ ОБРАБОТКИ<sup>1</sup>**

Асфандияров Р.Н.<sup>a,b</sup>, Аксенов Д.А.<sup>a</sup>, Шишкунова М.А.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: a.r.n@list.ru*

<sup>b</sup>*Уфимский университет науки и технологий,  
450076, Россия, Уфа, ул. Заки Валиди, 32, e-mail: AksyonovDA@mail.ru*

Надежность и долговечность имплантатов существенно зависят от состояния поверхности. В настоящей работе предложен подход к повышению сопротивления усталости УМЗ титана марки Grade 4, основанный на совершенствовании поверхности изделия методом безабразивной ультразвуковой финишной обработки (БУФО).

В результате проведенной работы показано, что БУФО приводит к заметной трансформации структуры поверхностного слоя УМЗ титана на глубину ~50 мкм. Формируется равноосная структура, происходит измельчение структурных фрагментов, средний поперечный размер составляет 120-140 нм. При этом БУФО привела к увеличению микротвердости поверхности более чем в 3 раза, до величины ~8000 МПа. В поверхностных слоях после БУФО преобладают сжимающие остаточные напряжения, достигающие 600 МПа, что заметно выше, чем у исходного УМЗ титана. Сравнительные усталостные испытания образцов с V-образной кольцевой выточкой в условиях изгиба с вращением позволили установить, что прирост предела ограниченной выносливости УМЗ образцов с БУФО на базе испытаний  $N = 3 \times 10^6$  достигает 15-20 %.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке молодежной лаборатории «Комбинированные поверхностные и объёмные методы обработки функциональных и конструкционных материалов» (договор № ЦПД-МЛ-10/РФ-23 от 21 ноября 2023 года)

## НЕКОТОРЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ПРИ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ <sup>1</sup>

Гундеров Д.В.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: dimagin@mail.ru

<sup>b</sup>Уфимский университет науки и технологий (УУНУТ)  
Россия, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32

В последние три десятилетия в мире активно развивается научное направление «получение объемных наноструктурных металлов и сплавов методами интенсивной пластической деформации (ИПД) или severe plastic deformation (SPD), созданное в начале 90-х уфимскими учеными под руководством проф. Р.З. Валиева [1,2]. В докладе рассмотрены некоторые этапы истории развития направления ИПД [3,4], а также некоторые общие закономерности и особенности трансформации структур и свойств материалов при ИПД [5], в том числе ранее анализируемые автором [6,7].

### Список литературы:

1. Валиев Р.З., Корзников А.В., Мулюков Р.Р. Структура и свойства металлических материалов с субмикроструктурной структурой // ФММ, 1992, Т. 2, № 6, С. 70-86.
2. Valiev R.Z., Krasilnikov N.A., Tsenev N.K. Plastic deformation of alloys with submicro-grained structure // Mater. Sci. Eng. A 1991, V. 137, P. 35–40.
3. Гундеров Д.В., Рааб Г.И., Решетникова Н.А., Семенова И.П., Исламгалиев Р.К., Зарипов Н.Г. Объемные наноструктурные материалы (к 20-летию института физики перспективных материалов угату) // Вестник АНРБ. 2015, Т. 20, № 3 (79), С. 50-61.
4. Edalati K. et al. Nanomaterials by severe plastic deformation: review of historical developments and recent advances // Mater. Res. Lett. 2022, V. 10, P. 163–256.
5. Глезер А.М., Сундеев Р.В., Шалимова А.В., Метлов Л.С. Физика больших пластических деформаций Успехи физических наук. 2023. Т. 193. № 1. С. 33-62.
6. Гундеров Д.В. Некоторые закономерности аморфизации и нанокристаллизации при интенсивной пластической деформации кристаллических и аморфных многокомпонентных сплавов // Электронный журнал "Исследовано в России". 2006, Т. 151, С. 1404-1413.
7. Тейтель Е.И., Метлов Л.С., Гундеров Д.В., Корзников А.В. О природе индуцируемых интенсивными пластическими деформациями структурных и фазовых превращениях в твердых телах. //ФММ 2012, Т. 113, № 12, С. 1–8.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФ 22-19-00347.

## ИЗМЕНЕНИЕ СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ СПЛАВА Ti18Zr15Nb ПОСЛЕ ИПДК И КРАТКОВРЕМЕННЫХ ОТЖИГОВ<sup>2</sup>

Гундерова С.Д.<sup>a,b</sup>, Чуракова А.А.<sup>a,b</sup>, Гундеров Д.В.<sup>a,b</sup>, Шереметьев В.А.<sup>c</sup>,  
Деркач М.А.<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, 450075, Россия, Уфа,  
пр. Октября 151, e-mail: gunderova@mail.ru, churakova\_a@mail.ru

<sup>b</sup>Уфимский университет науки и технологий (УУНУТ)  
Россия, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32

<sup>c</sup>Национальный исследовательский технологический университет (НИТУ)  
МИСИС Россия, г. Москва, Ленинский пр-кт, д. 4, стр. 1,  
e-mail: vadim.sheremetyev@gmail.com, miha-dir@mail.ru

Проведены исследования влияния интенсивной пластической деформации кручением (ИПДК) и кратковременных последеформационных отжигов (ПДО) на структуру и механические свойства  $\beta$ -титанового сплава Ti18Zr15Nb, перспективного материала для ортопедических имплантатов. В результате ИПДК в сплаве формируется наноструктурное состояние  $\beta$ -фазы с размером зерна менее 50 нм, а предел прочности ( $\sigma_b$ ) увеличивается с исходных значений 550 МПа до 1065 МПа. Однако после ИПДК разрушение образцов хрупкое. После ПДО 350°C 2,5 мин материал остается хрупким, а  $\sigma_b$  увеличивается до  $\approx 1230$  МПа. ПДО 450°C 2,5 мин приводит к выделению небольшого количества  $\alpha$ -фазы,  $\sigma_b$  при этом снижается до 917, и появляется пластичность  $\approx 8\%$ . В результате ПДО при температурах 525 и 550 °C 2,5 мин  $\sigma_b$  снижается до  $\approx 650$  МПа, пластичность поднимается до  $\approx 25\%$ , а на кривых растяжения наблюдался эффект «двойной текучести». От данных состояний можно ожидать реализацию в сплаве повышенной сверхупругости, как это наблюдалось на РКУП образцах Ti18Zr15Nb [1].

### Список литературы:

1. Derkach M.M., Gunderov D., Tabachkova N. et al. Effect of low and high temperature ECAP modes on the microstructure, mechanical properties and functional fatigue behavior of Ti-Zr-Nb alloy for biomedical applications // Journal of Alloys and Compounds, 2024, V. 976, 173147.

<sup>2</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФ 22-19-00347.

**МИКРОСТРУКТУРА И СВОЙСТВА СПЛАВОВ AL-Fe, ПОЛУЧЕННЫХ  
ЛИТЬЕМ В ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЙ КРИСТАЛЛИЗАТОР,  
ПОСЛЕ ДЕФОРМАЦИОННОЙ ОБРАБОТКИ <sup>1</sup>**

Жукова О.О., Медведев А.Е., Мурашкин М.Ю.

*Уфимский университет науки и технологий,  
450076, Россия, Уфа, ул. Заки Валиди, 32, e-mail: olga.zhukova96@mail.ru*

За последние десятилетия существенно возрос масштаб использования в электротехнике сплавов системы Al-Fe, например, марок 8030 и 8176, с содержанием железа в диапазоне от 0.3-1.0 вес. %. Как правило, проводники из этих материалов демонстрируют достаточно высокую электропроводность, но не отличается высокой прочностью (предел прочности  $\leq 160$  МПа) и термостойкостью. Поэтому улучшение комплекса свойств проводников из этих сплавов представляется актуальным.

В данной работе на примере сплавов Al-Fe с содержанием железа 0.5 и 1.7 вес. % проведены исследования возможности улучшения их физико-механических свойств, используя деформационную обработку, включающую равноканальное угловое прессование по схеме Конформ (РКУП-К) и холодное волочение (ХВ). Исходные заготовки сплавов были получены методом непрерывного литья в электромагнитный кристаллизатор (ЭМК) со скоростью кристаллизации расплава более  $10^3$  К/с. Применение данного метода обеспечило формирование в материалах исследования частицы фазы  $Al_2Fe$  метастабильной модификации, имеющие близкие к нанометрическому диапазону размеры. Последующая двухэтапная обработка РКУП-К и ХВ обеспечила получение проволоки с ультрамелкозернистой (УМЗ) структурой, с пределом прочности 239 и 310 МПа и электропроводностью 58.4 и 50.2% IACS (для сплава Al-0.5Fe и Al-1.7Fe соответственно). Образцы УМЗ проволоки продемонстрировали высокую термостойкость и возможность длительной эксплуатации при температуре 150°C.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 20-79-10133

## ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРОЗИОННОЙ СТОЙКОСТИ СПЛАВА $Ti_{49,0}Ni_{51,0}$ В КРУПНОЗЕРНИСТОМ И УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТОМ СОСТОЯНИЯХ<sup>1</sup>

Исхакова Э.И.<sup>a,b</sup>, Чуракова А.А.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Институт физики молекул и кристаллов Уфимский федеральный  
исследовательский центр Российской академии наук, Уфа, Россия,

<sup>b</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия,  
e-mail: [elmira.iskhakova.74@mail.ru](mailto:elmira.iskhakova.74@mail.ru)

Сплавы с памятью формы (СПФ), в частности, сплавы TiNi нашли широкое применение в медицине в качестве имплантируемых в организм длительно функционирующих материалов. Исследования проводились на сплаве  $Ti_{49,0}Ni_{51,0}$  с B2 структурой. Для получения крупнозернистой (КЗ) структуры проводили закалку сплава с последующими отжигами при температуре 430 °С 1 час и 10 часов. Ультрамелкозернистая (УМЗ) структура была получена с помощью равноканального углового прессования с аналогичными отжигами. Коррозионные испытания проводились в растворах солей, имитирующих биологическую среду организма: 0,9% NaCl, р-р Рингера, р-р Хэнкса с различным временем выдержки. Коррозионный процесс в сплаве  $Ti_{49,0}Ni_{51,0}$  протекал на всех образцах и во всех растворах в виде появления питтингов с образованием продуктов коррозии. В образцах с КЗ структурой коррозионный процесс протекал интенсивнее по сравнению с УМЗ. Анализ рельефа поверхности сплава показал то, что на поверхности сплава образуются кристаллы солей. Размеры рельефа поверхности в среднем достигают 2-7 мкм. Определены продукты коррозии методами ЭДС анализа и РФЭС. Данные исследования показали образование на поверхности оксидной пленки  $TiO_2$  и продуктов коррозии в виде кристаллов солей, соответствующих составам коррозионных сред, которые зависят от состава раствора и других факторов. В ходе испытаний микротвердость снижается вследствие коррозионного разрушения.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке фонда РФФ (проект № 22-73-00289, <https://rscf.ru/project/22-73-00289>).

**ВЛИЯНИЕ УКЛАДКИ НА ПОЛУЧЕНИЕ МЕТАЛЛОМАТРИЧНЫХ  
КОМПОЗИТОВ В СИСТЕМЕ Al-Cu МЕТОДОМ КРУЧЕНИЯ  
ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ**

Киеккужина Л.У.<sup>a</sup>, Зиякова Л.М.<sup>b</sup>, Зиннатов Р.Р.<sup>b</sup>, Зайцева К.А.<sup>b</sup>,  
Ахунов Э.Ф.<sup>b</sup>, Даниленко В.Н.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Институт проблем сверхпластичности материалов РАН,  
450001, Россия, Уфа, ул. С. Халтурина, 39, e-mail: leilamtm@mail.ru*

<sup>b</sup> *Уфимский университет науки и технологий,  
450076, Россия, Уфа, ул. З. Валиди, 32, e-mail: linara.ziakaeva@yandex.ru*

Твердофазные реакции, инициируемые кручением под высоким давлением (КВД), создают возможность для получения новых материалов [1,2].

Целью данной работы является изучение формирования макроскопической однородности металломатричных композитов, полученных деформацией КВД трех и пяти слойных стопок пластин меди и алюминия с различным типом укладки.

Стопки трех и пяти слойных пластин с различной укладкой Al и Cu, деформировали КВД при комнатной температуре под давлением 6 ГПа на 7 оборотов со скоростью 1 об/мин. Структуру образцов изучали методами растровой электронной микроскопии и энергодисперсионного анализа.

Показано, что однородность и механические свойства образца Al-Cu-Al-Cu-Al заметно лучше, чем в других исследованных образцах. Обсуждается механизмы формирования металломатричных композитов, полученных деформацией КВД.

**Список литературы:**

1. Даниленко В.Н. Мазитов Р.М. Влияние пластической деформации и после деформационного отжига на механической сплавление меди и алюминия сдвигом под давлением. // Сб. научных трудов «Нанотехнология и физика функциональных нанокристаллических материалов», Екатеринбург: УрО РАН 2005, С. 280-288.
2. Ahn B., Zhilyaev A.P., Lee H.-J., Kawasaki M., Langdon T.G. Rapid synthesis of an extra hard metal matrix nanocomposite at ambient temperature // Mater. Sci. Eng., 2015, 635, P. 109–117.

**НОВЫЕ НАУЧНЫЕ ИНСТРУМЕНТЫ ДЛЯ НАНОМАСШТАБНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ СОВРЕМЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ И ДИАГНОСТИКИ  
НАНОСТРУКТУР**

Козодаев Д.А., Нестеров С.И., Трусов М.А., Комарова С.О., Новиков И.А.

*ООО «АКТИВНАЯ ФОТОНИКА», 124460, г. Москва, г. Зеленоград,  
Панфиловский проспект, дом 10, кв./оф.49, e-mail: info@ntmdt-russia.com*

На Всероссийской конференции-школе с международным участием «Электронные, спиновые и квантовые процессы в молекулярных и кристаллических системах» мы представляем новейшее научное оборудование производства Группы компаний НТ-МДТ для исследований современных материалов и искусственно выращенных наномасштабных структур.

Многим исследователям известна линейка зондовых микроскопов Ntegra. Эти приборы зарекомендовали себя в научном сообществе, как инструменты высокого класса, отлично подходящие для решения сложных задач с исследованием различных физических свойств образца синхронно с топографической съемкой, в частности электрических, магнитных, механических.

Мы продолжаем совершенствовать аппаратную часть, ведем новые разработки компонент прибора, развиваем возможности нашего программного обеспечения в части применения нестандартных методик СЗМ и средств обработки данных. На конференции мы представим новую версию управляющего программного обеспечения для наших СЗМ и наш новый управляющий СЗМ контроллер, отличающийся рекордными возможностями в части функционала обработки сигналов, низкими шумами электроники, гибким конфигурированием, и открытой архитектурой, позволяющей упростить интеграцию наших СЗМ в более сложные экспериментальные нанотехнологические комплексы.

Современный функционал нашего оборудования позволяет получить интересные результаты в зондовых исследованиях наноматериалов, в частности в магнитно-силовой микроскопии и в микроскопии пьезо-отклика.

## **КАЧЕСТВЕННЫЙ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНЫЙ АНАЛИЗ ЛЕГИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА УСТАНОВКЕ X-RAY 4.0**

Кошуба В.В., Юсупов А.Р., Каримов Р.Х.

*Башкирский государственный педагогический университет им.М.Акумлы,  
Россия, Уфа, Октябрьской революции 3а, e-mail: fmf.bspu1967@yandex.ru*

Современное оборудование позволяет существенно упростить процесс анализа состава вещества. Наиболее эффективным и доступным методом определения состава вещества является рентгенография.

В работе была использована установка X-Ray 4.0. Данное оборудование представляет собой передовую технологию, позволяющую осуществлять неразрушающий контроль материалов с использованием рентгеновского излучения. Однако, оно относится к классу образовательных установок с небольшой мощностью рентгеновского излучения. Ее возможности включают в себя анализ микроструктуры, определение фазового состава, изучение дефектов и многое другое.

Целью настоящей работы было исследование состава вещества тонкопленочных структур представляющие собой многослойные пленки, состоящие из органических и неорганических соединений, а также полимерные пленки допированные ионами металлов.

Чтобы определить концентрацию элементов в образце с помощью рентгенофлуоресцентного анализа, проводится качественный анализ. Правильное соотношение интенсивности при условии, что она не перекрывается линией другого элемента, позволяет сделать выводы о концентрации элементов.

В докладе будут представлены результаты рентгенофлуоресцентного излучения, а также их анализ.

### **Список литературы:**

1. TESS expert Physics Handbook X-ray Experiments for XR 4.0 expert unit, (по-английски) Кат.номер: 01200-02 – 377 с.

**РАЗЛИЧИЯ ПРЕРЫВИСТОЙ И ДЛИТЕЛЬНОЙ ВЫДЕРЖКИ  
ОБРАЗЦОВ В КОРРОЗИОННОЙ СРЕДЕ ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ  
СКОРОСТИ КОРРОЗИИ СПЛАВА Zn–4%Ag-1%Cu<sup>1</sup>**

Поленок М.В.<sup>a,b</sup>, Хафизова Э.Д.<sup>a,b</sup>, Абдрахманова Э.Д.<sup>a</sup>, Исламгалиев Р.К.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> ФГБОУ ВО Уфимский университет науки и технологий,  
450076, Россия, Уфа, ул. Заки Валиди 32, e-mail: RENAWEIWEI.179@mail.ru

<sup>b</sup> Институт физики молекул и кристаллов  
УФИЦ РАН, 450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151

Биоразлагаемые сплавы на основе цинка рассматриваются как перспективные материалы для использования в медицине. Для создания таких материалов необходимо учитывать их механические и коррозионные свойства. Важным вопросом для каждого исследователя является выбор метода и режимов определения скорости коррозии для материала. Гравиметрический метод основанный на точном измерении массы образцов является одним из самых простых методов.

В данной работе представлено влияние прерывистой и длительной выдержки образцов в коррозионной среде (растворе Рингера (8,60 г NaCl, 0,30 г KCl, 0,33 г CaCl<sub>2</sub> на литр) pH=7) при определении скорости коррозии биodeградируемого цинкового сплава Zn–4%Ag-1%Cu. Испытания проходили при постоянной температуре 38±1 °С. При прерывистом методе образцы помещали в раствор и очищали каждые 48 часов от коррозионных отложений, взвешивали. При длительной выдержке образцы выдерживали в течение 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70 дней в растворе, обеспечивалось поддержание pH на уровне 7–7,8 путем измерения pH и заменой коррозионной среды без извлечения образцов. Потеря массы образцов прерывистом методом за 70 дней составляла 20,8%, а у образцов исследованных длительном методом – 17,1%, что можно объяснить влиянием нарастающей оксидной пленки у образцов при длительной выдержке.

---

<sup>1</sup> Работа Исламгалиева Р.К. выполнена при финансовой поддержке РФФИ и Научного и технологического исследовательского совета Турции в рамках научного проекта No 21-53-46017.

## **ПРОЕКТИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ НЕЙРОНОВ ДЛЯ РЕАЛИЗАЦИИ МАШИН ИЗИНГА В ВИДЕ ИНТЕГРАЛЬНЫХ ФОТОННЫХ ЧИПОВ**

Пшеничнюк И.А.

*Сколковский институт науки и технологий, 121205, Россия, Москва,  
Большой бульвар д.30, стр.1, e-mail: i.pshenichnyuk@skoltech.ru*

Последние достижения в области искусственного интеллекта (ИИ) очевидным образом демонстрируют его полезность. На сегодняшний день ИИ преимущественно представляет собой алгоритм, то есть компьютерную программу. Для создания максимально эффективного ИИ необходимы вычислительные системы с новой архитектурой, специально разработанной для данного класса алгоритмов. Одной из перспективных платформ для создания таких систем является интегральная фотоника, обещающая беспрецедентную скорость и параллельность обработки сигналов.

Структурной единицей нейроморфных чипов является фотонный нейрон. Несмотря на многообразие алгоритмов ИИ, функционал подобного узла более или менее стандартен. Он должен суммировать сигналы от связанных нейронов сети, а также осуществлять пороговую фильтрацию суммарного сигнала. Обе операции могут быть реализованы на базе интегральной кремниевой фотоники. Известно, что каскад оптических направляющих ответвителей способен реализовать умножение матрицы на вектор и, следовательно, может быть использован для взвешенного суммирования сигналов нейронов. Пороговая фильтрация, по определению, является нелинейной операцией и может быть реализована при помощи интегральных кольцевых микрорезонаторов.

В лаборатории плазмоники сколтеха изготавливаются все необходимые составные части подобных схем. Однако, существует ряд научных и инженерных задач, которые необходимо решить, чтобы сделать возможным создание нового поколения нейроморфных чипов. В данном докладе обсуждаются существующие проблемы и предлагаются пути их решения.

## ВЛИЯНИЕ ИПДК НА СТРУКТУРУ И МИКРОТВЁРДОСТЬ АМС НА ОСНОВЕ Zr С ДОБАВКОЙ Dy<sup>1</sup>

Титов В.В.<sup>a,b</sup>, Гундеров Д.В.<sup>a,b</sup>, Базлов А.И.<sup>c</sup>, Пархоменко М.С.<sup>c</sup>,  
Шарафутдинов А.В.<sup>a</sup>, Хорошавин А.С.<sup>b</sup>, Лебедев Ю.А.<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: molotovmelnik@gmail.com

<sup>b</sup>Уфимский университет науки и технологий,  
450076, Россия, Уфа, ул. Заки Валиди, 32

<sup>c</sup>Университет науки и технологий МИСИС,  
Россия, 119049, Москва, Ленинский пр-кт, д. 4, стр. 1. e-mail: kancela@misis.ru

Аморфные металлические сплавы (АМС) на основе циркония представляют значительный интерес для научного исследования [1, 2]. В настоящей работе было оценено влияние интенсивной пластической деформации кручением (ИПДК) на структуру и микротвёрдость АМС  $Zr_{62.5}Cu_{22.5}Al_{10}Fe_5$  и  $Zr_{62}Cu_{22}Al_{10}Fe_5Dy_1$ . Исходные АМС были получены в виде тонких лент методом спиннингования в индукционной печи DX-II в атмосфере аргона в НИТУ МИСИС. ИПДК проводилась при комнатной температуре и давлении 6 ГПа на плоских бойках и бойках с канавкой с разным числом оборотов.

Структура сплава после деформации кручением остаётся аморфной, что подтверждает другие исследования [3]. В результате деформации наблюдается некоторое снижение микротвёрдости и нанотвёрдости АМС в обоих сплавах. Проведено сравнение изменений твёрдости и структуры (по данным РСА) в зависимости от режимов ИПДК и состава сплавов.

### Список литературы:

1. Greer A.L. Metallic Glasses // Science, 1995, V. 267, P. 1947-53.
2. Louzguine-Luzgin D.V., Inoue A. Bulk Metallic Glasses. Formation, Structure, Properties, and Applications // Handb. Magn. Mater., 2013, V. 21, P. 131-71.
3. Astanin V., Gunderov D., Titov V., Asfandiyarov R. The Influence of High-Pressure Torsion on the Free Volume and Shear-Band Formation during the Indentation of Vit105 Metallic Glass // Metals, 2022, V. 12, P. 1278.

---

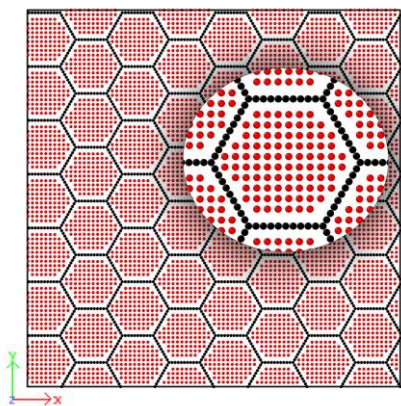
<sup>1</sup> Работа выполнена в рамках молодёжной лаборатории «комбинированные поверхностные и объёмные методы обработки функциональных и конструкционных материалов» (договор № ЦПД-МЛ-10/РФ-23 от 21 ноября 2023года).

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ И ДЕФОРМАЦИОННОГО ПОВЕДЕНИЯ КОМПОЗИТА С ЯЧЕЙСТОЙ СТРУКТУРОЙ.<sup>1</sup>

Тувалев И.И., Мурзаев Р.Т.

*<sup>a</sup>Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, 450001,  
Уфа, Россия, ул. Степана Халтурина, 39, e-mail: illumnus102@gmail.com*

Исследование новых типов композитов, включающих разнообразные компоненты, соединённые посредством физико-химических взаимодействий, становится всё более актуальным из-за возрастающих требований к характеристикам материалов. Особый интерес вызывает разработка новых углеродных композитов. В рамках данного исследования с использованием симулятора метода молекулярной динамики LAMMPS [1] были изучены стабильность и деформационные характеристики нового композита, основанного на ячеистой углеродной структуре с добавлением никеля. Была разработана атомистическая модель



**Рис. 1.** Композит никель-углерод в проекции на ось XY. Черным показаны атомы углерода, красным показаны атомы никеля.

композита на основе углеродной сотовой структуры (рис.1).

Созданный композит после глубокой релаксации показал устойчивость своей формы. В результате одноосного сжатия на 10% решетка никеля изменилась. Одноосное растяжение было проведено для трёх различных образцов: чистого никеля, ячеистой структуры с никелем и композита после двухосного сжатия. Выяснилось, что прочность на растяжение композита значительно выше,

чем у чистого никеля. Также было установлено, что влияние температуры и анизотропии композита незначительно.

### Список литературы:

1. <https://www.lammps.org/>

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 20-72-10112-П). Работа Мурзаева Р.Т. поддержана госзаказом молодежной лаборатории ИПСМ РАН.

## ОСОБЕННОСТИ КОРРОЗИОННО-МЕХАНИЧЕСКОЙ ПРОЧНОСТИ СПЛАВОВ TiNi С РАЗЛИЧНОЙ МИКРОСТРУКТУРОЙ В БИОЛОГИЧЕСКИХ РАСТВОРАХ<sup>1</sup>

Чуракова А.А.<sup>a,b</sup>, Исхакова Э.И.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, 450075, Россия, Уфа,  
пр. Октября 151, e-mail: churakova\_a@mail.ru

<sup>b</sup>Уфимский университет науки и технологий, 450076, Россия, Уфа,  
ул. Заки Валиди, 32, e-mail: elmira.iskhakova.74@mail.ru

Сплавы с памятью формы (СПФ) нашли широкое применение в медицине в качестве имплантируемых в организм длительно функционирующих материалов [1-2]. В качестве материала исследования были выбраны сплавы  $Ti_{49,4}Ni_{50,6}$ ,  $Ti_{49,2}Ni_{50,8}$ ,  $Ti_{49,1}Ni_{50,9}$  с В2 аустенитом, исследования проводились в крупнозернистом (КЗ) состоянии после закалки. После закалки образцы деформировали методом равноканального углового прессования по режиму В<sub>c</sub> (n=6, T=450°C) для получения ультрамелкозернистого состояния (УМЗ). В качестве коррозионных сред использовались следующие растворы: 1М HCl, 1М H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, 0,9 % NaCl, растворы Рингера, Хэнкса. Проведенные исследования коррозионного поведения сплавов TiNi различного химического состава в КЗ и УМЗ состояниях показали, что по мере увеличения содержания Ni механический показатель скорости коррозии увеличивается. В сплаве  $Ti_{49,2}Ni_{50,8}$  ультрамелкозернистое состояние является более коррозионностойким, чем крупнозернистое. Необычное изменение показателей предела прочности в сплаве  $Ti_{49,1}Ni_{50,9}$  требует проведения структурных исследований, для объяснения повышения прочностных характеристик при коррозионных испытаниях.

### Список литературы:

1. Otsuka K. // Prog. Mater. Sci., 2005, V. 50, № 5, P. 511-678.
2. Устинская Т.Н., Томашов Н.Д., Лубник Е.Н.// Электрохимия, 1987, Т. 23, С. 254-259.

<sup>1</sup> Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-00289, <https://rscf.ru/project/22-73-00289>

## ОСОБЕННОСТИ ИНТЕНСИВНОЙ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ КРУЧЕНИЕМ

Шарафутдинов А.В.<sup>a</sup>, Титов В.В.<sup>a,b</sup>, Гундеров Д.В.<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup>Уфимский университет науки и технологий, 450076, Россия,  
Уфа, ул. Заки Валиди, 32, e-mail: shar-alfred@list.ru.

<sup>b</sup>Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, 450075, Россия, Уфа,  
пр. Октября 151, e-mail: molotovmelnik@gmail.com, dimagun@mail.ru.

Проанализированы возможности интенсивной пластической деформации кручением (ИПДК) по различным режимам для измельчения зерна и получения наноструктурного состояния металлических материалов.

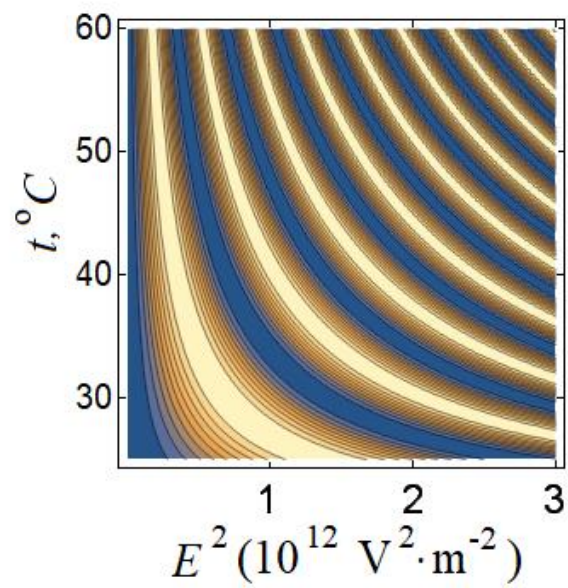
При ИПДК образец, имеющий форму диска диаметром 10—20 мм и толщиной 0.3—1.0 мм, подвергается деформации кручением в условиях высокого приложенного гидростатического давления [1]. Диск помещается на бойки, прилагается гидростатическое давление (до 6 ГПа), и пластическая деформация кручением достигается за счет вращения одного из бойков.

На уникальной научной установке «СКРУДЖ-200» Уфимского университета науки и технологий можно получать образцы с использованием оснастки с разной глубиной канавки или на плоских бойках. Регулировка количества оборотов  $n$ , типа оснастки, температуры ИПДК позволяет получить образцы с разной степенью деформации - измельчения структуры и, соответственно, с различными свойствами. Для достижения более высокой степени деформации, её более равномерного распределения по объёму образца, был предложен метод аккумулялирующей ИПДК [2].

### Список литературы:

1. Sharafutdinov A.V., Shundalov V.A., Latysh V.V. Application and Development of High-Pressure Torsion Scheme for the Formation of Nanostructures in Metals and Alloys // Fiz. Tech. Vys. Davl., 2002, 12(4), P. 76–80.
2. Gunderov D.V., Asfandiyarov R.N., Astanin V.V., Sharafutdinov A.V. Slippage during High-Pressure Torsion: Accumulative High-Pressure Torsion—Overview of the Latest Results // Metals, 2023, V. 13, P. 1340.

## Физика жидких кристаллов



## **ПРОЦЕССЫ ОБРАЗОВАНИЯ И ДИНАМИКА ПУЗЫРЬКОВЫХ ДОМЕНОВ В НЕМАТОХОЛЕСТЕРИКАХ**

Басырова Е.Р., Тимиров Ю.И., Скалдин О.А.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: Gareeva\_E82@mail.ru*

Экспериментально исследован процесс спонтанного формирования «капельных» доменных структур в ХЖК из системы холестерических пальцев в гомеотропно-ориентированном слое. Появление данных структур зависит от безразмерного параметра  $C = d/P_0$ , где  $d$  – толщина слоя, а  $P_0$  – шаг спирали. Для варьирования соотношения  $C$  в широком диапазоне, образец помещался на установку с контролируемым управление толщины. При малых значениях соотношения  $C$  спиральная структура ХЖК подавляется силой сцепления с подложками, и директор  $n$  раскручивается в однородную гомеотропную текстуру. При больших значениях  $C$  в слое формируется текстура типа «отпечатка пальцев», состоящая из периодических полос параллельных друг другу – домены. Текстура «отпечатка пальцев» организуется спонтанно, из которых далее формируется система капель, называемые «капельными» доменами («bubble domain»). При этом управляя толщиной слоя, мы можем формировать текстуры с различной плотностью упаковки доменов.

Изучено влияние приложенного напряжения при заданной частоте на электрооптические свойства «капельных» доменных структур. Получены зависимость роста диаметра капель от приложенного напряжения при заданной частоте. Причем увеличивается размер капель до тех пор, пока не заполнит все пространство между каплями, а выше некоторого значения приложенного напряжения капли начинают деформироваться. Полученные результаты обеспечивают возможный подход к управлению макроскопическими оптическими свойствами слоя ХЖК, содержащего спонтанно сформированные «капельные» домены.

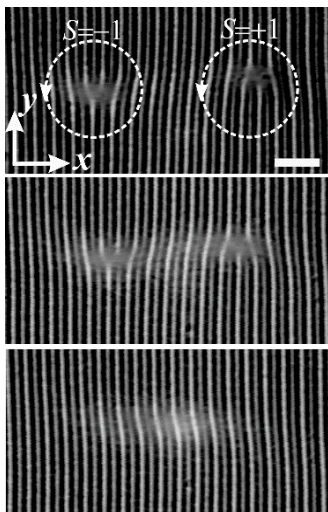
## ДИССИПАТИВНЫЕ СОЛИТОНЫ И ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ЭЛЕКТРОКОНВЕКТИВНОЙ СТРУКТУРЕ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА<sup>1</sup>

Делев В.А.<sup>a</sup>, Скалдин О.А.<sup>a</sup>, Салимов Р.К.<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: delew@anrb.ru

<sup>b</sup>Уфимский университет науки и технологий,  
450076, Уфа, З. Валиди, 32, e-mail: salems665@yandex.ru

Исследуется динамика и взаимодействие пары краевых дислокаций в электроконвективной (ЭК) структуре закрученного на  $\pi/2$  нематического жидкого кристалла (НЖК). В ЭК структуре роллов (доменов Вильямса-Капустина) закрученных на  $\pi/2$  НЖК, как и в планарно ориентированных, наблюдаются краевые дислокации с топологическими зарядами  $S=\pm 1$ . Движение дислокаций происходит как вдоль роллов (*climb* –переползание), так и перпендикулярно им (*glide* – скольжение). При этом дислокации с противоположными топологическими зарядами притягиваются, с одноименными – отталкиваются. Динамика и взаимодействие единичных дислокаций в планарных НЖК экспериментально изучены в работе [1]. Для описания их динамики использовался амплитудный подход (уравнение Гинзбурга-Ландау).



**Рис. 1.** Взаимодействие пары краевых *glide*-дислокаций в доменах Вильямса-Капустина.

исходит как вдоль роллов (*climb* –переползание), так и перпендикулярно им (*glide* – скольжение). При этом дислокации с противоположными топологическими зарядами притягиваются, с одноименными – отталкиваются. Динамика и взаимодействие единичных дислокаций в планарных НЖК экспериментально изучены в работе [1]. Для описания их динамики использовался амплитудный подход (уравнение Гинзбурга-Ландау).

В данной работе исследуется поведение дислокаций в ЭК структуре закрученного на  $\pi/2$  НЖК. Показано, что их взаимодействие (рис. 1) качественно хорошо описывается уравнением синус-Гордона с диссипативным слагаемым  $R(u_t)$  :

$$u_{tt} + R(u_t) - u_{yy} + \sin u = 0,$$

### Список литературы:

1. Rasenat S., Steinberg V., Rehberg I. Experimental studies of defect dynamics and interaction in electrohydrodynamic convection // Phys. Rev. A. 1990, V. 42, № 10, P. 5998-6008.

<sup>1</sup> Работа выполнена в рамках госзадания № НИОКТР И223011200702-4.

## ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ МОЛЕКУЛАМИ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА 5-ЦБ

Положенцева Е.А.<sup>а</sup>, Лебедев Ю.А.<sup>б</sup>, Кинзябулатов Р.Р.<sup>б</sup>, Мухамедзянова А.А.<sup>а</sup>

<sup>а</sup> Уфимский университет науки и технологий,  
450076, г. Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32, e-mail: mangonanas@mail.ru

<sup>б</sup> Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450054, Россия, г. Уфа, Проспект Октября, 71, e-mail: lebedev@anrb.ru

Введение магнитные наночастицы (МНЧ) в жидкие кристаллы (ЖК) вызывает большой интерес для фундаментальных исследований и технологических применений. МНЧ могут эффективно менять электрооптические и магнитооптические свойства ЖК, однако, введение частиц в ЖК-матрицы очень сложная задача из-за образования агрегатов. Один из перспективных способ решения этой проблемы - покрытие МНЧ специальными (про)мезогенными лигандами.

В настоящей работе методом алкилирования по Фриделю-Крафтсу осуществили модификацию олеиновой кислоты на поверхности магнитных частиц с 4-гидрокси-4-бифенилкарбонитрилом в присутствии безводного  $AlBr_3$ . Смесь в соотношении 1:5:1 нагревали до  $65^\circ C$  и выдерживали в течение 6 ч при перемешивании. Промывали ацетоном, отделяли магнитным полем и сушили.

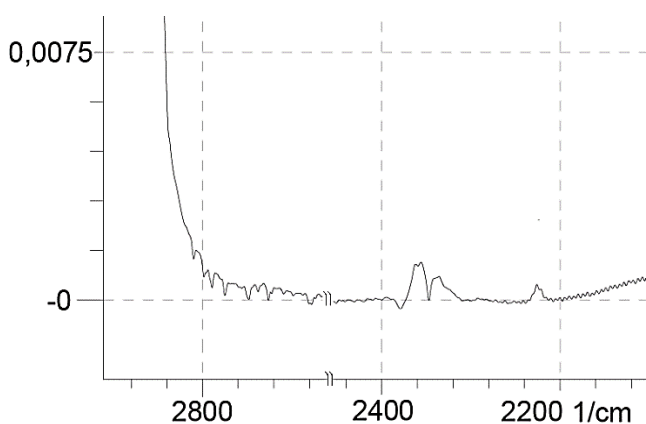


Рис. 1. ИК-спектр полученных магнитных частиц.

ИК-спектр полученных магнитных частиц показал малоинтенсивный пик в районе  $2250\text{ см}^{-1}$ , принадлежащий нитрильной группе. Это показывает возможность использования данного метода для покрытия МНЧ специальными (про)мезогенными лигандами. Следующая задача - оп-

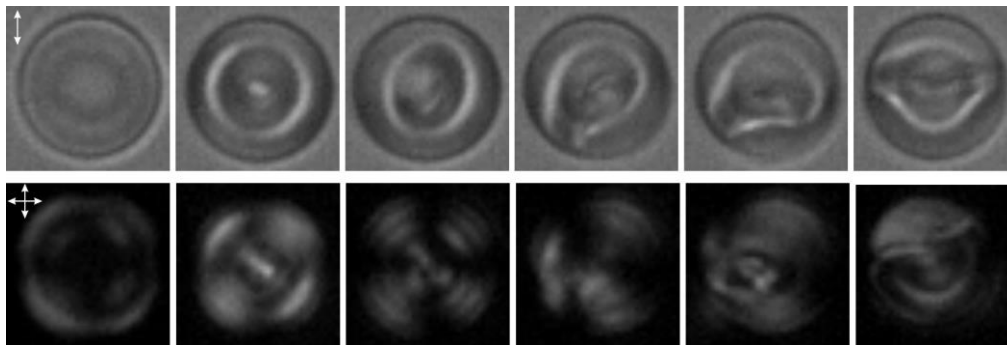
тимизировать условия и повысить выход реакции.

## ЦИКЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРНЫЕ ПЕРЕХОДЫ В КАПЛЯХ НЕМАТОХОЛЕСТЕРИКА В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Тимиров Ю.И., Басырова Е.Р., Скалдин О.А.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: timirov@anrb.ru*

В большинстве представленных работ исследуются равновесные состояния систем, где дефекты представляют собой в основном статические структуры. В нематохолестерических каплях дефекты формируются благодаря комбинации топологических ограничений, деформируемости капель и внешнего воздействия, что создает множество динамических состояний. Предметом данной работы является изучение аналогичного процесса, но в динамике, инициируемом внешним электрическим полем на примере системы идентичных нематохолестерических капель, выращенных из изотропного расплава в окрестности фазового перехода.



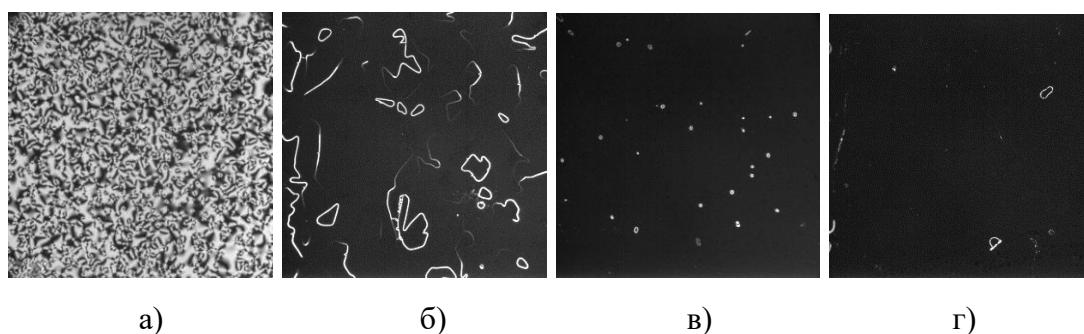
**Рис. 1.** Переходные структуры капель при различных значениях приложенного напряжения. В работе экспериментально показаны структурные переходы в каплях слабого нематохолестерического жидкого кристалла под действием переменного электрического поля. В отсутствие поля наблюдается стабильная однородная аксиальная структура. При включении поля данная структура переходит в биполярную, которая по мере увеличения напряжения трансформируется в твист биполярную. При приближении к пороговому напряжению перехода ЭГД начинается циклический непрерывный переход от скрученной биполярной структуры к радиальной сферической структуре и обратно.

## ЭНЕРГИЯ СЦЕПЛЕНИЯ НЕМАТИЧЕСКИХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ НА ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНОМ ОРИЕНТИРУЮЩЕМ ПОЛИМЕРЕ

Хорошавин А.С., Лебедев Ю.А., Хазимуллин М.В.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 71, e-mail: khoroshavin01@bk.ru*

Бесконтактные методы ориентации жидких кристаллов (ЖК) позволяют исключить загрязнение, а также возникновение локальных электростатических полей, свойственных методу натирания. В данной работе экспериментально исследовались планарные слои нематического жидкого кристалла 5СВ (4-n-pentyl-4'-cyanobiphenyl), ориентированные с помощью фоточувствительного полимера поливинилциннамата (ПВЦ), подвергнутого засветке линейно-поляризованным светом. В ячейках с временем засветки более 10 минут наблюдается появление однородной планарной ориентации (Рис.1).



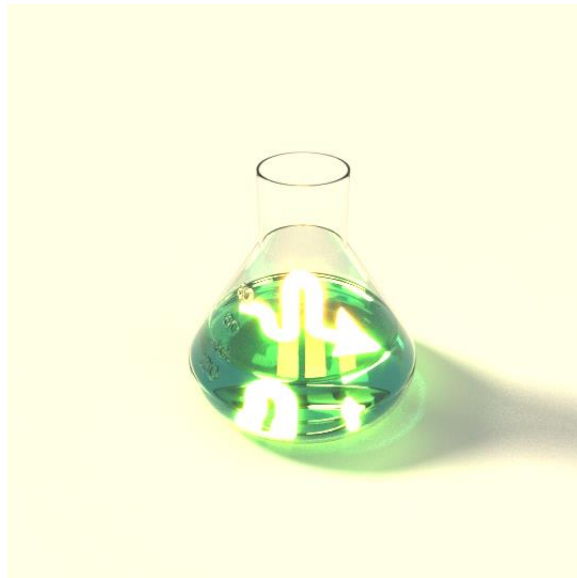
**Рис. 1.** Микроскопические изображения слоев МББА в геометрии скрещенных поляризаторов: а) 1 мин засветки ПВЦ, б) 7 мин, в) 15 мин, г) 30 мин.

Для определения энергии сцепления молекул ЖК с ПВЦ использовалась техника перехода Фредерикса в магнитном поле в планарных слоях 5СВ. Экспериментальная оценка энергии сцепления согласно [1] дает величину  $W = 6.15 \cdot 10^{-6}$  Дж/м<sup>2</sup>. Проведено сопоставление полученных результатов с литературными данными.

### Список литературы:

1. Yang K.H., Rosenblatt C. Determination of the anisotropic potential at the nematic liquid crystal-to-wall interface // Appl. Phys. Lett. 43(1), 1983

# Математические и КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ в физике



**АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРНОЙ КОМБИНАЦИИ  
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ГРУПП В МАКРОМОЛЕКУЛЕ НА  
ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА СО-ПОЛИАРИЛЕНЭФИРКЕТОНОВ<sup>1</sup>**

*Байбулова Г.Ш.<sup>a</sup>, Карамов Д.Д.<sup>b</sup>*

*<sup>a</sup> Башкирский государственный педагогический университет им. М.Акумлы,  
450077, Россия, г. Уфа, ул. Октябрьской революции, 3-а,  
e-mail: galiya\_shafkatovna@mail.ru*

*<sup>b</sup> Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: karamov\_danfis@bk.ru*

В работах [1-3] было проведено исследование сополимеров полиариленаэфиркетонов (со-ПАЭК), которые показали, что изменение электронных свойств происходит немонотонно при изменении содержания функциональных групп. Тщательного анализа этого феномена не проводилось. В связи с этим целью настоящей работы является исследование электронных свойств со-ПАЭК.

Проведены теоретические исследования электронной структуры соединений модельных для со-ПАЭК (мономеры, димеры и тетрамеры) методами квантовой химии и электрофизические исследования тонких пленок со-ПАЭК при вариации изопропилиденовой и флуореновой групп для установления закономерностей в изменении их характеристик.

Было установлено, что электрофизические свойства тонких пленок со-ПАЭК зависят не только от количественного содержания функциональных групп в сополимере, но и от строения функциональных центров в макромолекуле.

**Список литературы:**

1. Мошелёв А.В. Исследование особенностей переноса заряда в полиариленфталидах методом термостимулированного тока [Текст]: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07/ Мошелёв Алексей Васильевич // Уфа, 2009, 158 с.
2. Ильясов В.Х. Влияние химической структуры полиариленфталитов на токи термостимулированной деполяризации [Текст]: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 02.00.04/ Ильясов Вадим Хабибович // Уфа, 2011, 155 с.

---

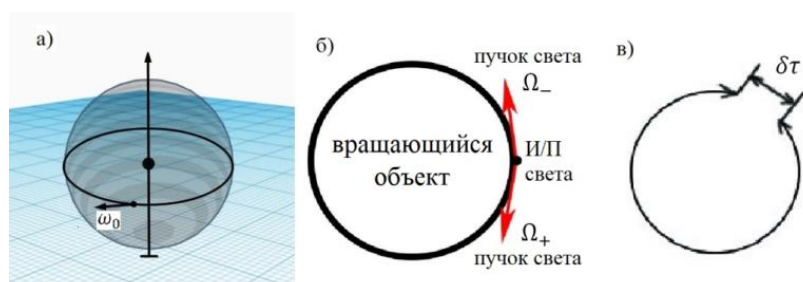
<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда, проект № 22-19-00535

## ЭФФЕКТ САНЬЯКА В ПРОСТРАНСТВЕ-ВРЕМЕНИ ВРАЩАЮЩИХСЯ ЧЕРНЫХ ДЫР С ПРИЛИВНЫМ ЗАРЯДОМ<sup>1</sup>

Каримов Р.Х.

БГПУ им. М.Акмиллы, 450077, Республика Башкортостан, г. Уфа,  
ул. Октябрьской Революции, д. 3А, e-mail: karimov\_ramis\_92@mail.ru.

Работа посвящена исследованию эффекта Саньяка [1] в пространстве-времени вращающейся черной дыры с приливным зарядом [2]. В самом общем случае эффектом Саньяка называется разность времен прохождения замкнутого



**Рис. 1.** Схематичное изображение эффекта Саньяка, где  $\omega_0$  – угловая скорость источника/приемника света,  $\Omega_+$  и  $\Omega_-$  – угловые скорости противоположно-направленных пучков света и  $\delta\tau$  – задержка Саньяка.

наблюдаемым и учитывается в спутниковых навигационных системах (GPS, ГЛОНАСС) при синхронизации временных сигналов.

В работе предполагается, что центральный массивный объект описывается пространством-временем черной дыры в модели Рэндалл-Сундрума [2] с приливным зарядом  $\beta$ . В случае негеодезического движения источника/приемника света эффект Саньяка имеет вид:

$$\delta\tau = \frac{4\pi[2aMR - a\beta - \{R^4 + a^2(R^2 + 2MR - \beta)\}\omega_0]}{R\sqrt{R^2 - 2MR + \beta + 2aM(2R - \beta/M)\omega_0 - \{R^4 + a^2(R^2 + 2MR - \beta)\}\omega_0^2}}, \quad (1)$$

где  $M$  – асимптотическая масса черной дыры,  $a$  – параметр вращения и  $R$  – радиус движения источника/приемника света.

### Список литературы:

1. Tartaglia A. General relativistic corrections to the Sagnac effect // Physical Review D, 1998, V. 58, P. 064009.
2. Randall L., Sundrum, R. A Large mass hierarchy from a small extra dimension // Physical Review Letters, 1999, V. 83, P. 3370-3373.

<sup>1</sup> Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-22-00391).

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВОДНОЙ СРЕДЫ НА ЭНЕРГИИ  
ГРАНИЧНЫХ ОРБИТАЛЕЙ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КЛАСТЕРОВ  
ДИОКСИДА ТИТАНА**

Михайлов Г.П.

*Уфимский университет науки и технологий,  
450076, Россия, Уфа, ул. Заки Валиди, 32, e-mail: gpmikhailov@mail.ru*

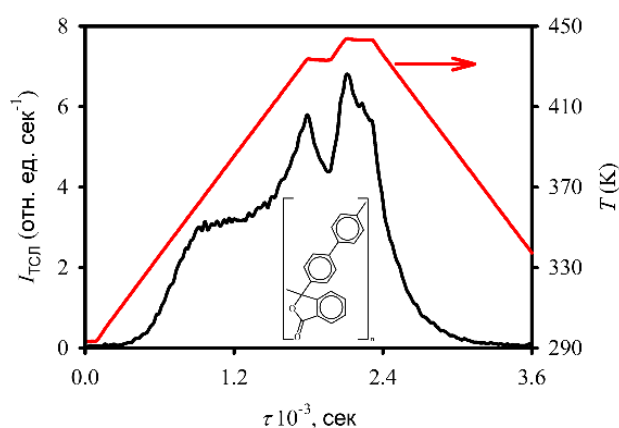
Наноразмерные частицы диоксида титана  $\text{TiO}_2$  перспективны в фотокатализе, преобразовании солнечной энергии и нанобиотехнологии. Наночастицы  $\text{TiO}_2$  используются часто в виде водных суспензий, поэтому особый интерес представляет исследование их взаимодействия с молекулами воды и оценки реакционной способности, которая определяется значениями энергий граничных молекулярных орбиталей. На начальной стадии формирования наночастиц  $\text{TiO}_2$  образуются молекулярные кластеры – это атомные объекты, состоящие из нескольких единиц до сотен атомов. Методом теории функционала плотности в приближении M06/6-31G(d,p) выполнен квантово-химический расчет равновесной геометрии, колебательного спектра и энергий граничных орбиталей комплексов  $(\text{TiO}_2)_{10}(\text{H}_2\text{O})_m$  ( $m=0-11$ ) в вакууме и водной среде (модель сольватации SMD). Анализ характеристик распределения электронной плотности в рамках «квантовой теории атомов в молекулах» (QTAIM) показал, что между кластером  $(\text{TiO}_2)_{10}$  и молекулами воды образуются нековалентные взаимодействия ионного характера с преобладающим вкладом в энергетику связывания контактов типа  $\text{Ti}\dots\text{O}$ , обладающих высокой динамической стабильностью. В рамках метода неэмпирической молекулярной динамики ADMP (Atom-Centered Density Matrix Propagation) установлена термостабильность моделируемых структур при  $T = 300$  К. Показано влияние температуры и воды как поляризуемой среды на энергии граничных орбиталей, значения которых находятся в сильной корреляционной связи с количеством молекул воды в первой гидратной оболочке.

## ТЕРМИЧЕСКИ СТИМУЛИРОВАННАЯ РЕКОМБИНАЦИЯ ИОН-РАДИКАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ В ПОЛИ(АРИЛЕНФТАЛИДАХ)

Овчинников М.Ю., Антипин В.А., Хурсан С.Л.

*Уфимский институт химии – обособленное структурное подразделение  
ФГБУН Уфимского федерального исследовательского центра РАН,  
450054, Россия, Уфа, пр. Октября 71, e-mail: тмуovchinnikov@anrb.ru*

Изучена термостимулированная люминесценция (ТСЛ) УФ-облученных пленок поли(дифениленфталида) (ПДФ). Кинетические кривые высокотемпературной ( $> 298$  К, рис. 1) ТСЛ описаны в рамках двухцентровой четырехстадийной схемы. Закономерности кинетики ТСЛ свидетельствуют о существовании двух независимых каналов, приводящих к генерации электронно-возбужденного дифениленового фрагмента. Рекомбинационные процессы с



**Рис. 1.** ТСЛ пленки ПДФ.

участием наиболее активных состояний осуществляются через две последовательные стадии и характеризуются невысокими значениями энергии активации, интерпретируемыми в рамках теории релаксационных процессов как колебания боковых фрагментов ПДФ триарилметильного типа (20-25 кДж·моль<sup>-1</sup>), и дифениленовых фрагментов (40-45 кДж·моль<sup>-1</sup>). Свыше 400 К ТСЛ обусловлена, вероятно, сегментной подвижностью полимера ( $E_a \approx 70$  кДж·моль<sup>-1</sup>). Предложена методика регистрации свечения пленок ПДФ при температурах от 77 К. Установлено, что криолюминесценция характеризуется более высокой интенсивностью и полихронной кинетикой затухания свечения.

### Список литературы:

1. Ovchinnikov M.Yu., Antipin V.A., Khursan S.L. Thermostimulated Luminescence of Poly(diphenylenephthalide) films. Kinetics and Mechanistic Steps of Irradiative Processes // Journal of Luminescence, 2020, V. 218, 116869.
2. Ovchinnikov M.Yu., Antipin V.A., Khursan S.L. Activation Mechanisms of Recombination Processes in Irradiated Poly(arylenephthalides) // Journal of Photochemistry & Photobiology, A: Chemistry, 2024, V. 448, 115347.

**НОВЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ ВЫРАЖЕНИЯ ДЛЯ УЧЕТА  
ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОЙ  
ПЛОТНОСТИ ЛИГАНДОВ В ТЕОРИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ  
НА РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ИОНАХ<sup>1</sup>**

Попов Д.В.<sup>a</sup>, Ликеров Р.Ф.<sup>a</sup>, Шафикова А.Е.<sup>b</sup>, Еремин М.В.<sup>b</sup>, Еремина Р.М.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского  
ФИЦ Казанский научный центр РАН, Россия, Казань, Сибирский тракт 10/7,  
e-mail: phys-tech@kfti.knc.ru

<sup>b</sup> Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
Россия, Казань, Кремлевская 18, e-mail: public.mail@kpfu.ru

Проблема пространственного распределения электронов в теории конденсированного состояния известна очень давно. До сих пор нет простых аналитических уравнений для расчета вклада этого распределения в кристаллическое поле. Нахождение этих уравнений позволит установить схемы энергетических уровней и волновые функции различных редкоземельных ионов в кристаллах. По полученным волновым функциям можно будет рассчитать параметры кристаллического поля. Как параметры кристаллического поля, так и экспериментальные данные о магнитных свойствах кристаллов, полученные, например, методом электронного спинового резонанса, ускорят создание микроскопической теории магнитоэлектрической связи.

Нам были получены аналитические формулы для вкладов в параметры кристаллических полей  $a^{(k)}$  на редкоземельных ионах, обусловленных пространственным распределением электронной плотности f-электронов и лигандов. Численные расчеты собственных параметров  $a^{(2)}$ ,  $a^{(4)}$  и  $a^{(6)}$  проведены на волновых функциях Хартри-Фока пар  $Nd^{3+} - O^{2-}$  и  $Er^{3+} - O^{2-}$ . Зависимости вклада расширенного заряда в собственные параметры от расстояния между ионами сравниваются с ожидаемыми в полуэмпирической модели обменных зарядов на металл-лигандной связи.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда Базис, проект № No 22-1-1-59-1

**ДВУХМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ПСЕВДОВРАЩЕНИЯ  
В 2-МЕТИЛТЕТРАГИДРОФУРАНЕ**

Файзуллин М.Г.

*Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,  
450075, Россия, Уфа, пр. Октября 151, e-mail: fayzullinmg@mail.ru*

Псевдовращение в гетероциклах – это энергетически наиболее выгодный способ конформационного превращения. В пятичленных насыщенных гетероциклах псевдовращение представляет собой взаимодействие двух наиболее низкочастотных колебаний – изгибных (bend) и скручивающих (twist). Для изучения данного вида конформационного превращения очень часто используют колебательную и вращательную спектроскопию.

Псевдовращение в 2-метилтетрагидрофуране исследовалось нами ранее в одномерном приближении с помощью методов квантовой химии и микроволновой спектроскопии. Мы пришли к заключению, что одномерная модель псевдовращения не совсем подходит для описания конформационной перестройки 2-метилтетрагидрофурана. В связи с этим сделана попытка описать псевдовращения молекулы в рамках двухмерной модели.

## ГОМОДЕСМОТИЧЕСКИЙ МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Хурсан С.Л.

*Уфимский институт химии УФИЦ РАН,  
450054, Россия, Уфа, пр. Октября 71, e-mail: khursansl@anrb.ru*

В представленном докладе дан краткий анализ существующих методов теоретической термохимии, особое внимание уделено основным идеям и методике гомодесмотического варианта сравнительного определения термохимических характеристик органических соединений.

Развитие гомодесмотического метода изучения молекулярной энергетики органических соединений осуществлено в виде концепции полного набора гомодесмотических реакций (ГДР). Для реализации концепции используется теоретико-графовый метод анализа структуры исследуемого соединения. Преимущество концепции полного набора ГДР перед традиционным подходом состоит в (1) повышении достоверности теоретической оценки термохимической величины, (2) контроле воспроизводимости результата и возможности разумного учета ненадежных референсных данных, (3) простая алгоритмизация и программирование рутинного конструирования ГДР полного набора, (4) анализ невалентных и вторичных энергетических эффектов, (5) чрезвычайно удачное сочетание и взаимодополняемость с вычислительными методами квантовой химии. Следует отметить, что, хотя методы квантовой химии весьма уместны в авторской методике, гомодесмотический метод в принципе можно использовать вообще без квантово-химических расчетов.

В докладе содержится обширный фактический материал, полученный автором с помощью гомодесмотического метода за последние 10 лет при изучении молекулярной энергетики молекулярных и радикальных структур, невалентных эффектов.

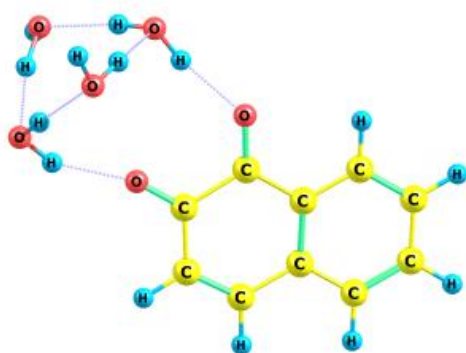
## СТРУКТУРА ВОДОРОДНЫХ КОМПЛЕКСОВ В ГИДРАТАХ МОЛЕКУЛЫ 1,2-НАФТОХИНОНА

Цеплина С.Н., Цеплин Е.Е.

Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН  
г. Уфа, пр. Октября, д. 151, e-mail: SN\_Tseplina@mail.ru

Одним из подходов хорошо учитывающий влияние растворителя на спектры поглощения и люминесценции является «метод супермолекулы», в котором для учета общих эффектов растворителя применяется модель поляризуемого континуума (PCM), а для учета специфических взаимодействий используется часть молекул растворителя, образующих водородный комплекс с молекулой растворенного вещества. При этом ключевой проблемой при данном подходе является определение количества таких молекул растворителя и их конфигурация.

Ранее [1], на основе анализа отклонений расчетных величин электронных



**Рис. 1.** Структура водородного комплекса молекулы 1,2-нафтохинона с 4 молекулами воды

переходов (PCM TDDFT B3LYP/6-311+G(d, p)) в среде *n*-гексана и воды от экспериментальных сдвигов полос поглощения в этих средах, рассмотрен вопрос об образовании в водном растворе водородных комплексов 1,2-нафтохинона (12NQ) с *n* молекулами воды ( $n = 1-4$ ).

Получено, что наилучшее

воспроизведение экспериментальных данных показывает Н-комплекс 12NQ с димером и циклическим тетрамером воды (**Рис. 1**), которые образуют замкнутую структуру с атомами кислорода карбонильных групп 12NQ. В настоящей работе увеличено число молекул ( $n = 5-10$ ), образующих Н-комплекс с молекулой 12NQ в растворе воды и проанализированы полученные закономерности.

### Список литературы:

1. Цеплина С.Н., Цеплин Е.Е. // Опт. и спектр., 2021, Т. 129, № 5, С. 599-607.

УДК 538.9

## КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОСТЕРЖНЕЙ В КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ И СПИРАЛЬНОЙ ПАРАДИГМАХ НА ПРИМЕРЕ ТЕЛЛУРА<sup>1</sup>

Эварестов Р.А., Порсев В.В., Бандура А.В.

*Институт химии СПбГУ, Россия, 198504, Санкт-Петербург, Петродворец,  
Университетский пр. 26, e-mail: director.chem@spbu.ru*

Симметрия наностержней рассматривается на базе симметрии исходного кристалла с использованием стержневых групп симметрии - подгрупп пространственных групп, в которых остаются только операции, связанные с трансляциями вдоль оставшегося периодического направления [1]. По этой причине в стержневых группах есть ограничение на порядок винтовой оси (1,2,3,4 или 6), происходящее из пространственных групп. Однако, квантово-химические



**Рис. 1.** Наностержень теллура в спиральной парадигме.

расчеты наностержней теллура показывают, что фиксирование кристаллографического порядка винтовой оси (в данном случае 3) является упрощением реальной картины (см. Рис. 1). Экспериментально показано, что ультратонкие наностержни теллура имеют форму закрученного стержня [2]. Если в исходной пространственной группе нет плоскостей отражения, то порядок винтовой оси наностержня лишь приблизительно равен

кристаллографическому. Поэтому для описания симметрии наностержней необходимо использовать спиральные группы, в которых возможны винтовые оси любого порядка, в т.ч. иррационального [3].

### Список литературы:

1. Evarestov R.A. // Theoretical Modeling of Inorganic Nanostructures. 2<sup>nd</sup> Ed., NanoScience and Technology, Springer Nature Switzerland AG, 2020.
2. Londoño-Calderon A., et al. Intrinsic helical twist and chirality in ultrathin tellurium nanowires // Nanoscale, 2021, V. 13, P. 9606.
3. Damnjanović M., Milošević I. // Line Groups in Physics. Lecture Notes in Physics, V. 801; Springer: Berlin/Heidelberg, Germany, 2010.

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда, проект № 24-23-00207

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА АККРЕЦИИ НА КРотовую НОРУ ДАМУРА-СОЛОДУХИНА<sup>1</sup>

Юсупова Р.М., Измаилов Р.Н., Каримов Р.Х.

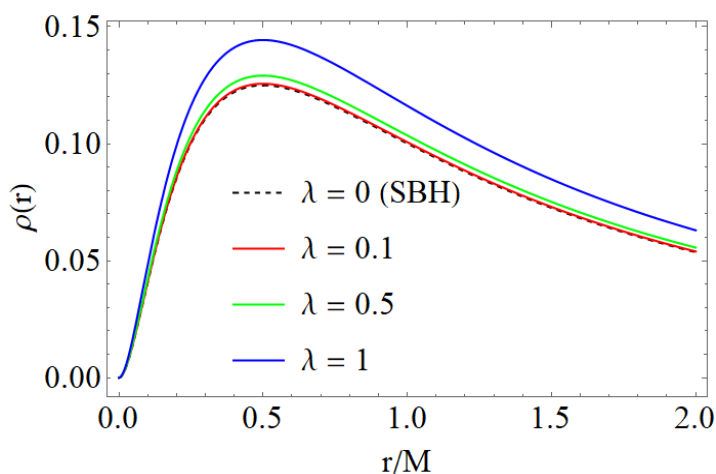
*Научно-исследовательская лаборатория  
«Международный центр астрофизики им. Я.Б. Зельдовича»  
Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмул-  
лы, 450077, Россия, Уфа, ул. Октябрьской революции, 3-а,  
e-mail: yu.rose@mail.ru*

В работе исследуется процесс аккреции по модели Бонди-Мишеля на кротовую нору Дамура-Солодухина (ДС), в частности влияние параметра  $\lambda$  на параметры сферически-симметричной аккреции. Метрика кротовой норы в изотропной системе координат задается как:

$$ds^2 = - \left( \frac{(1-\frac{M}{2r})^2}{(1+\frac{M}{2r})^2} + \lambda^2 \right) dt^2 + \frac{dr^2}{(1+\frac{M}{2r})^4} + (1 + \frac{M}{2r})^4 r^2 d\Omega^2. \quad (1)$$

Эта метрика отличается от решения Шварцшильда наличием безразмерного параметра  $\lambda$ . При  $\lambda = 0$  решение сводится к решению Шварцшильда для черной дыры.

В ходе работы были получены аналитические выражения для скорости и



плотности жидкостей, а также темпа аккреции. Как видно из рисунка 1, чем больше параметр  $\lambda$  для кротовой норы ДС, тем больше значение плотности аккрецирующей жидкости по сравнению с черной дырой Шварцшильда.

**Рис. 1.** График плотности жидкости в зависимости от радиальной координаты при аккреции пыли для различных значений  $\lambda$ .

<sup>1</sup> Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда проект № 23-22-00391.

## АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

### F

Fabrikant I.I. 6

Fang X.S. 28

### K

Kukhta A.V. 28

### L

Li Z.Q. 28

Lugovsky A.P. 28

### M

Maksimenko S.A. 28

Matejčík Š. 7

Modelli A. 8

### P

Pavich T.A. 28

Pyatakov A.P. 55

### V

Valynets N.I. 28

Vasil'ev Y.V. 9

### A

Абдрахманов А.М. 12

Абдрахманова Э.Д. 72, 82

Абдуллин М.Ф. 21

Аксенов Д.А. 73, 74

Андреев С.В. 67

Антипин В.А. 98

Архипов А.В. 67

Асадчиков В.Е. 31, 44

Астахов Н.В. 56

Асфандияров Н.Л. 10, 14,  
18, 19, 20, 58

Асфандияров Р.Н. 73, 74

Ахунов Э.Ф. 79

### Б

Базлов А.И. 84

Байбулова Г.Ш. 33, 95

Бандура А.В. 103

Басырова Е.Р. 89, 92

Баталов С.В. 68

Батулин Р.Г. 59

Бердоносков П.С. 56

Бессонов В.Д. 68

Буланкин Н.С. 29, 32

Булгаков Р.Г. 11

Бунаков А.А. 30, 42

Бунаков Н.А. 30

Бурбан Е.А. 64

### В

Василюк К.С. 11

Волков Ю.О. 31, 44

Воробьев А.С. 19

### Г

Галиев А.Ф. 29, 32, 37, 38

Галимов Д.И. 11

Гареев Б.М. 12

Гареева З.В. 69

Голяшов В.А. 58, 70

Горюнков А.А. 13, 14

Гундеров Д.В. 75, 76, 84,

87

Гундерова С.Д. 76

Гусев Н.С. 66

### Д

Давлятгареев Х.И. 33

Даниленко В.Н. 79

Делев В.А. 90

Деркач М.А. 76

Дроздов М.Н. 47

Дубов Е.А. 34, 40

### Е

Еремин М.В. 99

Ермина Р.М. 57, 59, 99

Естюнин Д.А. 70

Естюнина Т.П. 70

### Ж

Жукова О.О. 77

Жукович-Гордеева А.А. 31

### З

Зайцева К.А. 79

Зайцев Н.Л. 60, С3

Зиннатов Р.Р. 79

Зиякова Л.М. 79

Зорина М.В. 47

### И

Иванов А.И. 35

Измаилов Р.Н. 104

Ильясов В.Х. 36

Исламгалиев Р.К. 82

Исхакова Э.И. 78, 86

Ишмухаметов М.С. 32, 37

## **К**

Каманцев А.П. 61

Карамов Д.Д. 30, 33, 36, 38, 41, 53, 95

Каримов В.Р. 37

Каримов Р.Х. 37, 43, 81, 96, 104

Кахрамонов А.М. 49, 50

Квашнина Е.О. 39

Киеккужина Л.У. 79

Кинзябулатов Р.Р. 91

Киселев В.В. 62, 63

Козлякова Е.С. 56

Козодаев Д.А. 80

Комарова С.О. 80

Комолова А.А. 40

Комолов А.С. 34, 40

Корнилов В.М. 39, 41

Кох К.А. 70

Кошкидько Ю.С. 61

Кошуба В.В. 81

Курляндская Г.В. 64, 67

Кустов Д.А. 58

## **Л**

Лазнева Э.Ф. 40

Лачинов А.А. 32, 33

Лачинов А.Н. 36

Лебедев Ю.А. 84, 91, 93

Ликеров Р.Ф. 99

Лукин В.Г. 22, 24

## **М**

Маити Т. 57

Малясова А.С. 46

Маркова А.В. 14, 21

Медведев А.Е. 77

Миргалина Э.А. 42

Митянов В.С. 23

Михайленко М.С. 47

Михайлов Г.П. 97

Моськин А.В. 56

Мукминова Р.Р. 43

Мурашкин М.Ю. 77

Мурзаев Р.Т. 85

Мусабилов И.И. 61

Муфтахов М.В. 10, 15, 19, 23, 26

Мухамедзянова А.А. 91

## **Н**

Назаров А.А. 73

Незнахин Д.С. 67

Нестеров С.И. 80

Новиков И.А. 80

Нуждин А.Д. 31, 44

## **О**

Овчинников М.Ю. 98

Остальцова А.Д. 45, 48

Островский Б.И. 31

## **П**

Панова Н.А. 16

Пархоменко М.С. 84

Пахомов Г.Л. 46

Пашенькин И.Ю. 66

Пестов А.Е. 47

Петрова Д.В. 47

Пожидаев Е.П. 31

Поленок М.В. 72, 82

Положенцева Е.А. 91

Поляков Н.Э. 17

Пономарев А.Ф. 36

Попов Д.В. 59, 99

Порсев В.В. 103

Пронин И.А. 40

Пшеничнюк И.А. 83

Пшеничнюк С.А. 10, 18, 19, 20, 40, 58

## **Р**

Райтман О.А. 23

Расковалов А.А. 63

Рахмеев Р.Г. 10, 18, 19, 58

Рейес Х.Д. 57

Роцин Б.С. 31, 44

Рыбальченко А.В. 14

## **С**

Салазкин Н.С. 30

Салимов Р.К. 90

Салихов К.М. 65

Салихов Р.Б. 45, 48, 52

Салихов Т.Р. 48

Сапожников М.В. 66

Сафронов А.М. 20, 21, 50

Свалов А.В. 64, 67

Сементеева Ю.Р. 73

Ситдииков В.Д. 72

Скалдин О.А. 89, 90, 92

Соболев В.С. 40

Степанов С.А. 58

Стужин П.А. 46

## **Т**

Тарасов А.В. 70

Таюпов М.М. 14, 20, 21, 34

Телегин А.В. 68

Теплов В.С. 68

Терентьев А.Г. 23

Терещенко О.Е. 18, 58, 70

Тимиров Ю.И. 89, 92

Титов В.В. 84, 87

Тихонов А.М. 44

Травкин В.В. 46

Трусов М.А. 80

Тувалев И.И. 85

Туймедов Г.М. 22

Туктаров Р.Ф. 15

Тухбатуллин А.А. 16

## **У**

Убович М. 34

## **Ф**

Фазлижанова Д.И. 59

Файзуллин М.Г. 100

Филиппова В.В. 69

## **Х**

Хазимуллин М.В. 93

Хатымов Р.В. 23, 26

Хафизова Э.Д. 72, 82

Хвостенко О.Г. 22, 24

Хорошавин А.С. 84, 93

Хурсан С.Л. 98, 101

## **Ц**

Цеплин Е.Е. 24, 102

Цеплина С.Н. 24, 102

## **Ч**

Чеботарева А.Б. 38

Чижов Ю.В. 25

Чуракова А.А. 76, 78, 86

Чхало Н.И. 47

## **Ш**

Шамбулина В.Н. 36

Шапошникова В.В. 30, 38

Шарафеев Р.В. 32

Шарипов Г.Л. 12, 16

Шарипов Т.И. 51

Шаропов У.Б. 49, 50

Шарафутдинов А.В. 84, 87

Шафикова А.Е. 99

Шереметьев В.А. 76

Шикин А.М. 70

Шишкунова М.А. 73, 74

## **Щ**

Щукин П.В. 15, 26

## **Э**

Эварестов Р.А. 103

## **Ю**

Юмалин Т.Т. 52

Юсупов А.Р. 43, 53, 81

Юсупова Р.М. 104

Юшков А.А. 64

## **Я**

Якупова С.М. 11

Якшембетова Л.Р. 12

Яхин А.Р. 53

Яцык И.В. 57, 59

# Спонсор конференции



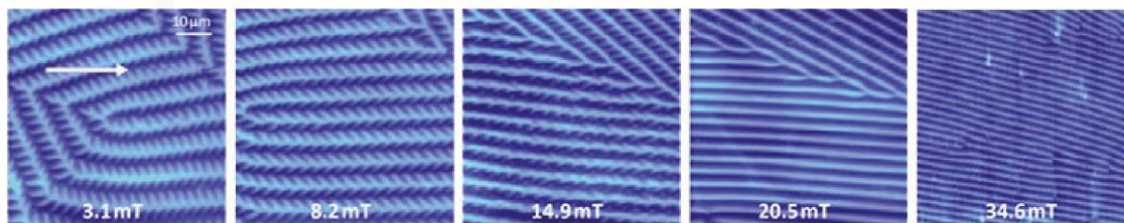
**АКТИВНАЯ  
ФОТОНИКА**

**NTEGRA MFM - новые возможности для изучения магнитных материалов.**

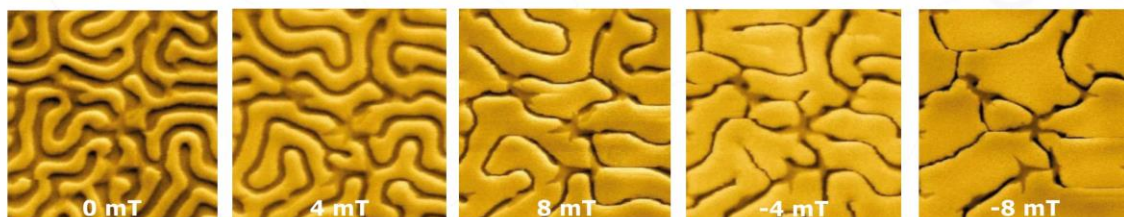
- Поляризационный Магнитооптический Микроскоп, совмещенный с СЗМ
- Двухлучевой балансный поляриметр
- Продольное и поперечное внешнее магнитное поле
- Высокая чувствительность и разрешение МСМ

### Новейшая разработка:

- Горизонтальное магнитное поле: до  $\pm 2500$  Гаусс;
- Вертикальное магнитное поле: до  $\pm 1100$  Гаусс;
- Скорость нарастания поля: до 2500 Гаусс/мин;
- Разрешение датчика Холла:  $\sim 10$  Гаусс;
- Минимальный шаг увеличения поля: 10 Гаусс;
- Размер образца  $5 \times 5$  мм, высота образца  $\leq 1.3$  мм.



Перестройка доменной структуры пленки граната во внешнем горизонтальном магнитном поле. Направление поля указано стрелкой. Размер изображения:  $58 \times 58$  мкм.

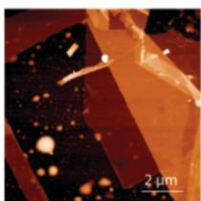


МСМ изображения пленки граната во внешнем вертикальном магнитном поле. Видно расширение доменов, направление намагниченности которых совпадает с направлением внешнего поля. Образцы предоставлены Проф. Ф.В. Лисовским, Институт Радиоэлектроники РАН. Размер изображения:  $90 \times 90$  мкм.

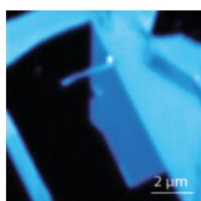
[www.ntmdt-russia.com](http://www.ntmdt-russia.com)

**Передовые технологии в отечественном приборостроении**

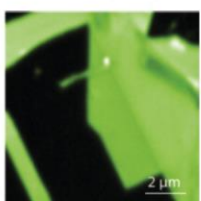
**NTEGRA Spectra для комплексных исследований физических и химических свойств материалов.  
АСМ+Раман+СБОМ+TERS**



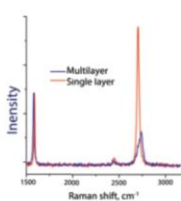
Топография



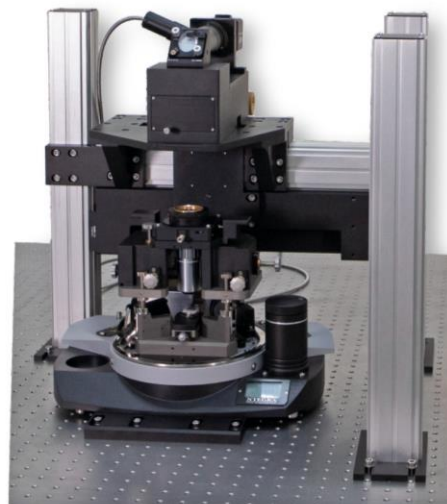
Интенсивность G-диапазона



Интенсивность 2D-диапазона



Рамановский спектр



#### Чешуйки графена на Si/SiO<sub>2</sub>

- Все возможности и режимы Атомно-Силовой Микроскопии
- Объединение СЗМ и Конфокальной/Рамановской микроскопии/спектроскопии
- Зондово-Усиленная Рамановская Спектроскопия (TERS) с нанометровым разрешением
- Все возможные схемы возбуждения/регистрации, оптический доступ сверху, снизу и сбоку
- Спектрометр на отечественной компонентной базе
- Автоматизированная настройка и управление

#### Мы являемся ведущим разработчиком и производителем:

- оборудования для зондовой микроскопии и спектроскопии
- научных инструментов высокого класса для экспериментальных исследований в области нанотехнологий

#### Наша деятельность

- поставка оборудования
- пуско-наладка оборудования
- гарантийное и пост-гарантийное обслуживание
- снабжение расходными материалами

#### Наши клиенты

- ведущие институты РАН
- крупнейшие российские университеты
- образовательные центры

[www.ntmdt-russia.com](http://www.ntmdt-russia.com)

**Передовые технологии в отечественном приборостроении**



# Международная аэрокосмическая школа имени космонавта-испытателя СССР У. Н. Султанова



Новое поколение детей планирует стать учеными, космонавтами, инженерами, летчиками, руководителями предприятий, конструкторами.

В Республике Башкортостан работает Международная аэрокосмическая школа имени космонавта-испытателя СССР Урала Назиповича Султанова. Задача школы – выявление и поддержка молодых людей, увлеченных ракетно-космической техникой, наукой, организацией труда, авиацией, физикой, математикой, астрономией, которые хотят поступать в высшие учебные заведения и потом работать в научно-исследовательских учреждениях, в конструкторских бюро, на предприятиях военно-промышленного комплекса Башкирии и России, в Роскосмосе, Росатоме. И, конечно, патриотическое воспитание молодежи, любовь к Родине.



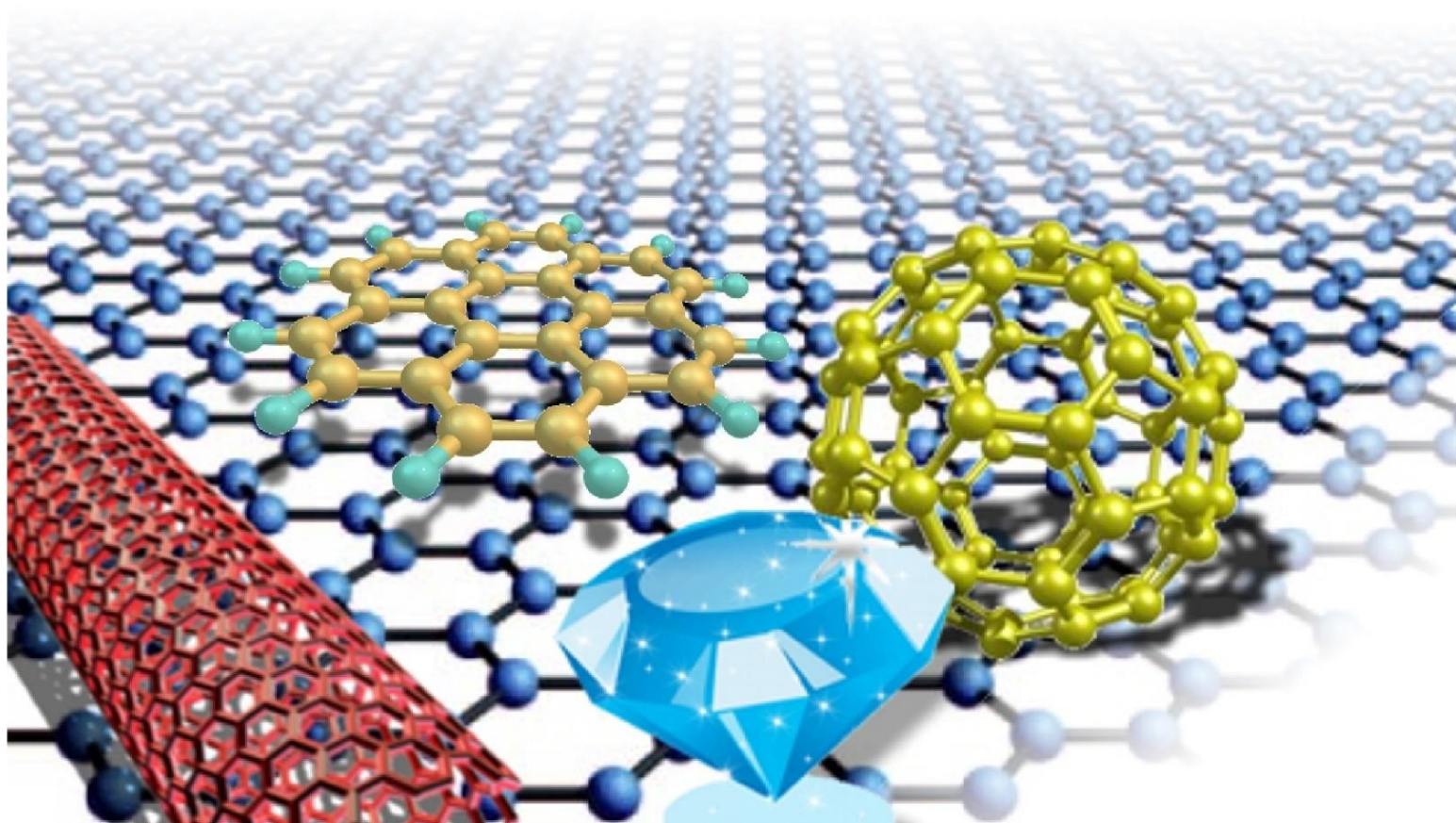
В Международной аэрокосмической школе обучаются школьники 6-9 классов, победители и призеры Олимпиад, конкурсов, чтений, увлеченные физикой, математикой, биологией, химией, астрономией, космонавтикой, авиацией.

В школе ребята занимаются спортом, слушают лекции, участвуют в Олимпиаде, организуют концерты, ставят спектакли, встречаются с космонавтами, летчиками, преподавателями, депутатами, учеными Российской академии наук, руководителями предприятий, военными. В школе происходит постоянный соревновательный процесс между командами, подводятся итоги с награждением отличившихся. Продолжительность заезда десять дней.



В 2024 году Международная аэрокосмическая школа тринадцатый раз откроет свои двери для школьников в д. Калиновка Давлекановского района Республики Башкортостан.





Уфа - 2024